



Approximation des phases aleatoires self-consistante. Applications a des systemes de fermions fortement correles

Mohsen Jemai

► To cite this version:

Mohsen Jemai. Approximation des phases aleatoires self-consistante. Applications a des systemes de fermions fortement correles. Physique mathématique [math-ph]. Université Paris Sud - Paris XI, 2004. Français. NNT : . tel-00006530

HAL Id: tel-00006530

<https://theses.hal.science/tel-00006530>

Submitted on 20 Jul 2004

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Université Paris XI — Institut de Physique Nucléaire d'Orsay

Thèse de Doctorat

pour l'obtention du grade de

Docteur de l'Université Paris XI
en co-tutelle avec l'Université de Tunis El-Manar
Spécialité: Physique Théorique

présentée par

Mohsen JEMAI

Convention de Cotutelle de Thèse du 2 mai 2001
(arrêtés ministériels du 5 juillet 1984, du 30 mars 1992 et du 18 janvier 1994)

Approximation des Phases Aléatoires Self-Consistante – Applications à des Systèmes de Fermions Fortement Corrélés

Soutenue publiquement le 01 Juillet 2004 devant la commission d'examen:

M. Raouf	BENNACEUR	Directeur de Thèse
M. Habib	BOUCHRIHA	
M. Jorge	DUKELSKY	Rapporteur
M. Michel	HERITIER	
M. Julius	RANNINGER	Rapporteur
M. Peter	SCHUCK	Directeur de Thèse

Thèse préparée au sein de l'Institut de Physique Nucléaire d'Orsay (IPNO)

Remerciements

Ce travail a été réalisé à l'institut de Physique Nucléaire d'Orsay (IPNO) –Groupe de Physique Théorie, dans le cadre d'une thèse en co-tutelle entre l'Université Paris XI et l'Université de Tunis El-Manar. Cette thèse a été dirigée par Raouf Bennaceur, Professeur à la Faculté des Sciences de Tunis (FST) et directeur de l'Institut de Recherche Scientifique et Technologique (INRST) et Peter Schuck, Directeur de Recherche CNRS et Directeur du Groupe de Physique Théorie à Orsay.

Je tiens à remercier Peter Schuck, avec qui j'ai travaillé étroitement, de m'avoir accueilli dans son groupe et qu'il a toujours su me faire bénéficier de son savoir et de son expérience. Sa grande disponibilité, ses précieux conseils, son aide constant, sa confiance ainsi que la liberté d'action qu'il m'a accordée m'a permis de mener à bien ce travail. Je lui exprime ma plus grande gratitude pour l'excellente formation qu'il m'a offerte durant ces trois années.

Je remercie Raouf Bennaceur pour avoir accepté de diriger cette thèse en cotutelle à qui j'adresse mes remerciements les plus vifs, ma profonde gratitude et l'expression de ma grande reconnaissance.

Mes remerciements vont ensuite à Jorge Dukelsky et Julius Ranninger pour leurs remarques, critiques, encourageantes et amicales, ainsi que pour leur travail de rapporteur.

Je remercie vivement Michel Héritier qui m'a fait l'honneur de présider le jury de cette thèse ainsi que l'intérêt qu'il porte à ce travail.

Un grand merci au staff du service informatique et principalement à Marie-Thérèse Commault qui m'a aidé beaucoup par sa disponibilité ainsi je n'oublierais pas mon premier séjour où elle m'a fait visiter Paris, la ville des lumières, en découvrant tous les sites intéressants.

Je voudrais ensuite remercier tous les membres du groupe de physique théorie de l'Institut de Physique Nucléaire d'Orsay pour leur accueil sympathique et pour l'environnement de travail qu'ils m'ont offert. Principalement, Marcella Grasso, Elias Khan, Gai van Nguyen, Michael Urban, Nicole Vinh Mau et désolé pour ceux que j'ai oublié pour les discussions fructueuses que j'ai eu avec eux ainsi la relation amicale qu'ils m'ont offerte.

Je voudrais remercier aussi tous mes amis (ou plutôt) mes frères, M. Bensetti ("le chauve"), F. Faouzi ("le gros"), H. Boutaous, Z. Makni, M. Tafergunit ... la liste est très longue ... s'ils ne sont pas sur ce papier, ils savent qu'ils sont dans mon cœur, pour m'avoir aidé à oublier que je suis loin de chez moi et qui m'ont offert un climat familial.

Enfin un grand merci à toute ma famille, qui m'ont apporté tout ce dont j'avais besoin pour réaliser ce travail.

Table des matières

Remerciements	iii
Introduction	1
1 Modèle de pairing multi-niveaux	9
1.1 Modèle de pairing multi-niveaux	9
1.2 Symétrie particule-trou de l'hamiltonien	11
1.3 Application du formalisme RPA particule-particule	11
1.4 Discussion des résultats pour $\Omega = 10$	16
1.5 Conclusion	18
2 Modèle de Hubbard	21
2.1 Le problème électronique d'un solide réaliste	21
2.2 Modèle de Hubbard à deux-sites	24
2.2.1 Approximation Hartree Fock	24
2.2.2 Hamiltonien de quasiparticules Hartree Fock	27
2.2.3 Réponse de charge et spin longitudinal	31
2.2.4 Reformulation du problème	38
2.2.5 Réponse du spin transverse	41
2.2.6 Réponse du canal particule-particule	47
2.3 Règle de somme pondérée par l'énergie	55
2.4 Comparaison avec d'autres méthodes	58
2.5 Conclusion	60
3 Modèle de Hubbard à six-sites	63
3.1 Hamiltonien de quasiparticules	66
3.2 Réponse de charge et spin longitudinal	67
3.2.1 Calculs de $\langle n_{k_i\sigma} \rangle$ et $\langle n_{k_i\uparrow} n_{k_j\downarrow} \rangle$	70
3.2.2 <i>ph</i> -RPA standard	71

3.2.3	<i>ph</i> -SCRPA	76
3.3	Règle de somme pondérée par l'énergie	83
3.4	Séparation en excitations de ' <i>charge</i> ' et de ' <i>spin longitudinal</i> '	85
3.5	Nombre d'occupations	86
3.6	Réponse du canal particule-particule	88
3.6.1	Développement des équations <i>pp</i> -RPA	90
3.6.2	<i>pp</i> -RPA standard	93
3.6.3	<i>pp</i> -SCRPA	97
3.7	Règle de somme pondérée par l'énergie	98
3.8	Discussion et Conclusion	99
4	Hubbard dans base des ondes planes	103
4.1	Approximation Hartree-Fock	104
4.2	Chaine demi-pleine avec la projection du spin $m_s = \pm 1$	105
4.2.1	Hamiltonien de quasiparticules	105
4.2.2	<i>ph</i> -RPA standard	107
4.2.3	<i>ph</i> -SCRPA	111
4.3	Chaine demi-pleine avec la projection du spin $m_s = 0$	112
4.3.1	Hamiltonien de quasiparticules Hartree-Fock	113
4.3.2	<i>ph</i> -RPA standard	114
4.3.3	<i>ph</i> -SCRPA	117
4.4	Conclusion	118
5	Modèle à 4-sites dans la base déformée	121
5.1	Approximation de Hartree-Fock	121
5.2	Hamiltonien de quasiparticules	124
5.3	Réponse de charge et spin longitudinal	126
5.3.1	Approximation Tamm-Dancoff	127
5.3.2	<i>ph</i> -RPA standard	130
5.3.3	<i>ph</i> -SCRPA	132
5.4	Limite du couplage fort	133
5.5	Conclusion	135
	Conclusion générale	137
A	Fonctions de corrélations	141
A.1	Fonctions de corrélations <i>ph</i>	141
A.2	Fonctions de corrélations <i>pp</i>	142

B	Solution exacte	145
B.1	Solution exacte du modèle de Hubbard à 2-sites	145
B.1.1	Base réelle	145
B.1.2	Base des ondes planes	146
B.2	Solution exacte du modèle de Hubbard à 4-sites	147
B.2.1	Solution exacte dans base des ondes planes	148
B.2.2	Solution exacte dans base déformée	151
B.2.3	Solution exacte analytique du modèle de Hubbard à 4-sites	155
B.3	Solution exacte du modèle de Hubbard à 6-sites	157
	Bibliographie	159

Table des figures

1.1	Schéma de niveaux pour le modèle de pairing multi-niveaux	10
1.2	La différence des énergies fondamentales des deux systèmes $\Omega = 10$, $N = 12$ et $\Omega = N = 10$	16
1.3	L'énergie du premier état excité du système avec $\Omega = 10$ et $N = 12$ rela- tivement au système avec $\Omega = 10$ et $N = 12$	17
1.4	L'énergie de corrélation du fondamental pour le système à $\Omega = 10$ en fonc- tion de l'interaction de paire G	18
1.5	L'énergie de corrélation du fondamental en fonction du nombre de niveaux Ω pour $G = 0.21$	19
2.1	Energie fondamental HF en fonction de ϑ pour le cas à 2-sites.	25
2.2	Densités HF en fonction de U pour le cas à 2-sites demi-pleins. on note par d_1 les valeurs moyennes de densités dans l'état HF de $\hat{n}_{1,\uparrow}$ et $\hat{n}_{2,\downarrow}$ et d_2 les valeurs moyennes de densités dans l'état HF de $\hat{n}_{2,\uparrow}$ et $\hat{n}_{1,\downarrow}$	26
2.3	Energies d'excitations HF à une particule en fonction de U pour le cas à 2-sites demi-plein avec la projection de spin $m_s = 0$ (équ. (2.18)).	29
2.4	Spectre d'excitation des quasiparticules HF à $U = 0$ pour le cas à 2-sites. . .	30
2.5	Energies d'excitation ph -RPA standard, ph -SCRPA (réponse de charge) et celles exactes dans la région sphérique ($W = 1$) pour le cas à 2-sites. . . .	35
2.6	Energies du fondamental HF, ph -RPA standard, ph -SCRPA (réponse de charge) et exacte dans la région sphérique pour le cas à 2-sites.	36
2.7	Nombre d'occupation en fonction de U	39
2.8	Energies d'excitation ph -RPA standard (trait tiré), ph -SCRPA (les croix) et exacte (ligne pleine) dans la réponse de spin pour le cas à 2-sites.	44
2.9	Energie du fondamental en approximation HF (en pointillé), ph -RPA (trait tiré), ph -SCRPA (les croix) et exacte (ligne pleine) dans la réponse de spin pour le cas à 2-sites.	45

2.10	Valeur propre Ω pp -RPA standard, pp -SCRPA (pour $\eta = 1$) et celle exacte (qui est confondue avec la solution SCRPA pour toute valeur de U) en fonction de U dans la région sphérique.	51
2.11	Energies du fondamental HF, pp -RPA, pp -SCRPA et exacte dans la région sphérique pour le cas à 2-sites.	52
2.12	Règle de somme pondérée par l'énergie dans la réponse de charge pour le cas à 2-sites. On note par M.D et M.G les membres de droite et de gauche de l'égalité (2.131) qui sont calculés avec la SCRPA.	56
2.13	Règle de somme pondérée par l'énergie dans la réponse de spin pour le cas à 2-sites. On note par M.D et M.G les membres de droite et de gauche de l'égalité (2.131) qui sont calculés avec la SCRPA.	57
2.14	Règle de somme pondérée par l'énergie pour le canal particule-particule pour le cas à 2-sites. On note par M.D et M.G les membres de droite et de gauche de l'égalité (2.131) qui sont calculés avec la SCRPA.	58
2.15	Energie fondamentale du modèle de Hubbard à 2-sites en fonction de $\frac{U}{2t}$ [39]. "1" représente la solution exacte. "2" est la solution de la fonctionnelle LW (2.137) avec la méthode GW standard. "3" représente la solution de (2.137) avec la GW standard pour l'énergie cinétique et G_{HF} pour l'interaction. "4" représente la solution de (2.137) avec G_{HF} . "5" représente la solution de (2.137) avec la GW self consistante.	59
2.16	Comparaison de la solution GA+RPA, HF+RPA et exacte pour l'énergie fondamentale du modèle de Hubbard à 2-sites. Egalement, on représente l'occupation double comme une fonction de $\frac{U}{t}$ avec les mêmes approches. . .	61
3.1	Spectre d'excitation HF à $U = 0$ pour la chaîne à 6-sites demi-pleine avec la projection de spin $m_s = 0$	65
3.2	L'énergie de l'état fondamental du système à 6-sites demi-pleins avec la projection de spin $m_s = 0$ pour la réponse de charge dans le canal ph	77
3.3	Spectre d'excitation ph du système à 6-sites demi-pleins avec la projection de spin $m_s = 0$ pour le vecteur d'onde de transfert $ q = \pi$	78
3.4	Spectre d'excitation ph du système à 6-sites demi-pleins avec la projection de spin $m_s = 0$ pour le vecteur d'onde de transfert $ q = \frac{2\pi}{3}$	80
3.5	Spectre d'excitation ph du système à 6-sites demi-pleins avec la projection de spin $m_s = 0$ pour le vecteur d'onde de transfert $ q = \frac{\pi}{3}$	81

3.6	Rapport, $R = \frac{MD-MG}{MD}$, de la règle de somme pondérée par l'énergie dans la réponse de charge pour le cas à 6-sites. On note par MD et MG les membres de droite et de gauche de l'égalité (3.67) qui sont calculés avec la SCRPA.	84
3.7	Le rapport, r (éq. 3.71), en fonction de l'interaction U pour les excitations particule-trou $(2, 4)$ et $(3, 5)$ du canal $q = \frac{\pi}{3} $	85
3.8	Nombre d'occupation en fonction de l'interaction U pour différentes valeurs du moment k pour les états de particules. Pour chacune des approximations (s-RPA et SCRPA), les nombres d'occupations sont représentés par ordre croissant en k $(-\pi, -\frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{3})$. Remarquons que les modes $k = \frac{2\pi}{3}$ et $k = -\frac{2\pi}{3}$ sont dégénérés.	86
3.9	Nombre d'occupation en fonction de l'interaction U pour différentes valeurs du moment k pour les états de trous. Pour chacune des approximations (s-RPA et SCRPA), les nombres d'occupations sont représentés comme $k = 0, \frac{\pi}{3}, -\frac{\pi}{3}$. Remarquons que les modes $k = \frac{\pi}{3}$ et $k = -\frac{\pi}{3}$ sont dégénérés. . . .	87
3.10	Spectre d'excitation pp -RPA standard (trait tiré), pp -SCRPA (croix) et exact (trait plein) du système à 6-sites demi-pleins avec la projection de spin $m_s = 0$ et un vecteur d'onde total $K = 0$	94
3.11	Spectre d'excitation pp -RPA standard (trait tiré), pp -SCRPA (les croix) et exact (trait plein) du système à 6-sites demi-pleins avec la projection de spin $m_s = 0$ et un vecteur d'onde total $K = \pm\frac{\pi}{3}$	95
3.12	Spectre d'excitation pp -RPA standard (trait tiré), pp -SCRPA (croix) et exact (trait plein) du système à 6-sites demi-pleins avec la projection de spin $m_s = 0$ et un vecteur d'onde total $K = \pm\frac{2\pi}{3}$	96
3.13	L'énergie de l'état fondamental HF (trait pointillé), pp -RPA standard (trait tiré), pp -SCRPA (croix) et exact (trait plein) du système à 6-sites demi-plein avec la projection de spin $m_s = 0$ dans le canal pp.	97
3.14	Règle de somme pondérée par l'énergie pour le canal particule-particule pour le cas à 6-sites. On note par MD et MG les membres de droite et de gauche de l'égalité (2.131) qui sont calculés avec la SCRPA.	99
4.1	Spectre d'excitation HF à $U = 0$ pour la chaîne à 4-sites demi-pleine avec la projection de spin $m_s = 0$. Les états occupés sont représentés par les flèches pleines et ceux non-occupés sont représentés par les flèches trait-tiré. . . .	103
4.2	Spectre d'excitation HF à $U = 0$ pour la chaîne à 4-sites demi-pleine avec la projection de spin $m_s = -1$. Les états occupés sont représentés par les flèches pleines et ceux non-occupés sont représentés par les flèches trait-tiré. . . .	106

4.3	Comparaison des énergies d'excitations exactes, ph -RPA standard et ph -SCRPA pour la réponse de charge pour $ q = \frac{\pi}{2}$	109
4.4	Comparaison des énergies d'excitations exactes, ph -RPA standard et ph -SCRPA pour la réponse de charge pour $ q = \pi$	110
4.5	L'énergie du fondamental HF, ph -RPA, ph -SCRPA et exact dans la réponse de charge pour $m_s = -1$	111
4.6	Spectre d'excitation HF à $U = 0$ pour la chaîne à 4-sites demi-pleine avec la projection de spin $m_s = 0$. Les états occupés sont représentés par les flèches pleines et ceux non-occupés sont représentés par les flèches trait-tiré.	112
4.7	Spectre d'excitation obtenu par la ph -RPA standard, ph -SCRPA et exacte pour $q = \frac{\pi}{2}$ dans le cas où on élimine les mode d'excitation zéro dans la base sphérique et $m_s = 0$	115
4.8	Spectre d'excitation obtenu par la ph -RPA standard, ph -SCRPA et exacte pour $q = \pi$ dans le cas où on élimine les modes d'excitation zéro dans la base sphérique et $m_s = 0$	116
4.9	Energie du fondamental obtenue par la ph -RPA standard, ph -SCRPA et exacte dans le cas où on élimine les modes d'excitations zéro dans la base des ondes planes et pour la projection de spin $m_s = 0$	117
5.1	Cette figure représente la valeur de ϑ , qui correspond à l'énergie minimale HF, en fonction de U (cas à 4-sites avec une transformation HF générale).	123
5.2	Cette figure représente les nombres d'occupation du site 1, $n_{1,\uparrow}$ et $n_{1,\downarrow}$, en fonction de l'interaction U	124
5.3	Spectre d'énergies HF à une quasiparticule en fonction de l'interaction U	127
5.4	Représentation de la distribution de densités de spin sur chaque sites	128
5.5	Les corrections apportées par la solution TDA par rapport à la solution exacte dans la réponse de charge. Les corrections sont définies comme $r_i = \frac{\mathcal{E}_i^{exact} - \mathcal{E}_i^{TDA}}{\mathcal{E}_i^{exact}}$ (cas à 4-sites avec une transformation HF générale).	129
5.6	Variation des termes $\delta_1 = \frac{2\chi_7}{e_3 - e_1}$ et $\delta_2 = \frac{2\chi_3}{e_4 - e_1}$ en fonction de U , dans la réponse de charge (cas à 4-sites avec une transformation HF générale).	131
5.7	Les corrections apportées par la RPA standard par rapport à la solution Tamm-Dancoff dans la réponse de charge. Les corrections sont définies comme $C_i = \frac{\mathcal{E}_i^{s-RPA} - \mathcal{E}_i^{TDA}}{\mathcal{E}_i^{TDA}}$ (cas à 4-sites avec une transformation HF générale).	132
5.8	Comparaison du spectre ph -RPA et ph -SCRPA avec celui exact dans la réponse de charge (cas à 4-sites avec une transformation HF générale).	133

5.9	Comparaison du spectre ph -RPA et ph -SCRPA avec celui exact dans la réponse de charge (cas à 4-sites avec une transformation HF générale). . . .	134
5.10	Comparaison de l'énergie fondamentale Hartree-Fock, ph -RPA standard et ph -SCRPA avec celle exacte (cas à 4-sites avec une transformation HF générale).	135
B.1	Représentation de la distribution de densités de spin sur chaque sites	152

Liste des tableaux

2.1	Comparaison des résultats de l'approximation HF, ph -RPA standard, ph -SCRPA et exacts pour l'énergie fondamentale dans le cas à deux sites. . .	40
2.2	Comparaison des résultats de la ph -RPA standard, ph -SCRPA et exacts pour le premier et deuxième état excité dans le cas à deux sites.	41
2.3	Comparaison des résultats de la pp -RPA standard, pp -SCRPA et exacts pour le premier état excité dans la base sphérique.	54
2.4	Comparaisons des résultats de l'approximation HF, pp -RPA standard, pp -SCRPA et exacts pour l'énergie fondamentale dans la base sphérique. . . .	54
3.1	Comparaison des résultats de l'approximation HF, ph -RPA standard, ph -SCRPA et exacts pour l'énergie fondamentale dans le cas à 6-sites.	82

Introduction

Remarques générales

Le problème à N –corps en général et celui des fermions fortement corrélés en particulier sont loin d’être résolus, en dépit du fait que d’énormes progrès ont été accomplis ces dernières décennies. Dans cette introduction, nous ne voulons pas passer en revue toutes les approches qui ont été développées dans le passé et qui sont actuellement en utilisation. Remarquons simplement qu’il y a les approches qui tentent d’être variationnelles à la Raleigh Ritz en partant d’une fonction d’onde d’essai, comme par exemple l’ansatz de Jastrow [1] ou qui essaient de minimiser le grand potentiel par des méthodes de Monte Carlo quantiques et qu’il y a des approches basées plutôt sur des arguments physiques ou perturbatifs et qui ressemblent par exemple une certaine classe de diagrammes de Feynman. La très populaire “Random Phase Approximation (RPA)” fait partie de cette dernière catégorie [2, 3]. L’objectif de cette thèse est précisément d’élaborer et de tester une généralisation de la RPA en l’appliquant au modèle de Hubbard bien connu pour décrire un système d’électrons fortement corrélés. Il n’existe pratiquement pas de système du problème à N –corps où la RPA n’est pas utilisée : bien entendu c’est le cas dans la matière condensée où elle a été inventée, mais depuis elle est appliquée également en physique nucléaire, en physique des plasmas, en théorie des champs relativistes, pour décrire les atomes et molécules, pour traiter les corrélations dans les systèmes bosoniques, etc. etc...

La RPA considère les corrélations à deux corps du type densité–densité en resommant les boucles particules–trous (ph –RPA). Mais il existe aussi une RPA qui resomme les échelles et traite donc les corrélations particule–particule (pp –RPA) [1]. La RPA est basée sur une théorie non moins célèbre, à savoir, sur l’approximation du champ moyen ou Hartree–Fock (HF). Précisément une des possibles dérivations des équations RPA est de linéariser les équations du champ moyen dépendant du temps autour de l’équilibre. C’est cette dernière définition que nous allons utiliser et ce que nous allons appeler RPA standard (s-RPA) par la suite dans ce mémoire. En dépit de sa popularité, l’approche RPA a aussi ses défauts. Ceci tient surtout au fait qu’elle viole le principe de Pauli (la fameuse

approximation des “quasibosons”) et qu’on démontre facilement qu’elle contient une inconsistance interne (partiellement liée aux quasibosons). Ceci est par exemple clairement mis en évidence en considérant la fonction de réponse à un champ externe $\sim \exp(i \vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)$ en approximation RPA [4]:

$$\chi(\omega, q) = \frac{\chi^0(\omega, q)}{1 - v(q)\chi^0(\omega, q)} \quad (1)$$

où $v(q)$ est la transformée de Fourier de l’interaction à deux corps, χ^0 est la fonction de Lindhardt,

$$\chi^0(\omega, q) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{n^0(\frac{\vec{q}}{2} + \vec{p}) - n^0(\frac{\vec{q}}{2} - \vec{p})}{\omega - \frac{\vec{p} \cdot \vec{q}}{2}} \quad (2)$$

et $n^0(q)$ sont les nombres d’occupation HF qui, à $T = 0$, prennent les valeurs 0 ou 1. Comme la RPA se veut précisément de traiter des corrélations, il est anormal qu’on trouve à l’intérieur de son expression des quantités non corrélées comme les $n^0(q)$. Ceci ne peut être compris que dans un sens perturbatif ce qui limite l’application à des corrélations relativement faibles.

Survol du formalisme

A cause de ces défauts, maintes essais ont été entrepris pour améliorer la RPA [1, 5]. Inutile de vouloir tous les présenter. L’extension sur laquelle est basée ce présent travail a été commencé par K. Hara [6] et élaboré par Rowe et ses collaborateurs [4, 7] et est basée sur la méthode des équations du mouvement (EOM). Récemment, Dukelsky et Schuck et indépendamment G. Röpke et ses collaborateurs ont encore davantage investi dans cette théorie [2, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16] ce qui est maintenant appelée RPA Self Consistante (Self consistent Random phase Approximation : SCRPA) ou Cluster Hartree–Fock (CHF), respectivement. Une des manières de dériver cette théorie est donnée par une analogie à la façon dont M. Baranger a établi les équations HF [17]. Pour ceci, il a regardé une énergie moyenne d’une particule :

$$\begin{aligned} \epsilon_k &= \sum_{n, (N+1)} (E_n^{N+1} - E_0^N) |\langle 0 | a_k | n, N+1 \rangle|^2 + \sum_{n, (N-1)} (E_0^N - E_n^{N-1}) |\langle n, N-1 | a_k | 0 \rangle|^2 \\ &= \frac{\langle 0 | \{ a_k, [H, a_k^\dagger] \} | 0 \rangle}{\langle 0 | \{ a_k, a_k^\dagger \} | 0 \rangle} \end{aligned} \quad (3)$$

où $|0\rangle$ et H sont en principe le fondamental et l’hamiltonien exacts du système. $\{\dots, \dots\}$ est l’anticommutateur, $[\dots, \dots]$ est le commutateur et $a_k^\dagger = \sum_\nu D_{k\nu} c_\nu^\dagger$ sont les opérateurs

de création de fermions qu'on obtient à partir d'une base quelconque c_ν^\dagger par une transformation unitaire, D . L'énergie, ϵ_k , se présente comme la différence des énergies du système avec $N \pm 1$ particules et l'énergie du fondamental du système avec N particules pondérée par les facteurs spectroscopiques. Il est alors facile de se convaincre que la minimisation de ϵ_k par rapport aux amplitudes $D_{k\nu}$ donne directement les équations HF usuelles en se basant sur un Hamiltonien avec une interaction à deux corps,

$$H = \sum_{12} t_{12} a_1^\dagger a_2 + \frac{1}{4} \sum_{1234} \bar{v}_{1234} a_1^\dagger a_2^\dagger a_4 a_3 . \quad (4)$$

Il est évident que ceci peut aussi être étendu aux bosons. Cependant, aussi bien pour les fermions que pour les bosons, il est souvent utile de partir non pas de la transformation HF mais de la transformation Hartree–Fock–Bogoliubov (HFB). Par exemple, pour les bosons, on a

$$q_\alpha^\dagger = \sum_i u_{i,\alpha} b_i^\dagger - v_{i,\alpha} b_i \quad (5)$$

et on minimise

$$\epsilon_\alpha = \frac{\langle 0 | [q_\alpha, [H, q_\alpha^\dagger]] | 0 \rangle}{\langle 0 | [q_\alpha, q_\alpha^\dagger] | 0 \rangle} \quad (6)$$

par rapport aux amplitudes u et v . On vérifie aisément que ceci donne directement les équations HFB pour les bosons [17]

$$\begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \sum_i |u_{\alpha i}|^2 - |v_{\alpha i}|^2 = 1 \quad (7)$$

où h et Δ sont l'hamiltonien du champ moyen et le champ d'appariement, respectivement. Pour évaluer

$$h_{ij} = \langle 0 | [b_i, [H, b_j^\dagger]] | 0 \rangle \quad \text{et} \quad \Delta_{ij} = \langle 0 | [b_i, [H, b_j]] | 0 \rangle \quad (8)$$

explicitement en fonction des amplitudes u et v , il est utile d'utiliser le fait que le fondamental, $|HFB\rangle$, est le vide des destructeurs des quasiparticules définies en (5), c'est à dire

$$q_\alpha |HFB\rangle = 0 , \quad \text{pour tout } \alpha \quad (9)$$

et q'on vérifie l'inversion de (5), c'est à dire

$$b_i^\dagger = \sum_\alpha u_{\alpha i}^* q_\alpha^\dagger + v_{\alpha i}^* q_\alpha . \quad (10)$$

Rappelons à ce stade que les équations (7) se dérivent également en utilisant le formalisme des fonctions de Green. Ceci nous mène aux équations bien connues [18] de Gorkov

$$\begin{pmatrix} -i\frac{\partial}{\partial t} - h & -\Delta \\ \Delta^* & -i\frac{\partial}{\partial t} + h^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{G} \\ \mathcal{F} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta(t-t') \\ 0 \end{pmatrix} \quad (11)$$

où \mathcal{G} est la fonction de Green à 1-boson

$$\mathcal{G}_{\alpha,\alpha'}^{t-t'} = -i \langle 0|T b_{\alpha}(t) b_{\alpha'}^{\dagger}(t')|0\rangle \quad (12)$$

avec T l'opérateur chronologique et $|0\rangle$ en principe le fondamental exact du système avec N -particules. $b_{\alpha}(t) = e^{iHt} b_{\alpha}(0) e^{-iHt}$ formé avec H , l'hamiltonien du système. La fonction \mathcal{F} est le propagateur anormal

$$\mathcal{F}_{\alpha,\alpha'}^{t-t'} = -i \langle 0|T b_{\alpha}^{\dagger}(t) b_{\alpha'}^{\dagger}(t')|0, N-2\rangle \quad (13)$$

qui lie les fondamentaux avec N et $N-2$ particules. Nous avons donné ici les expressions avec les fonctions de Green uniquement pour des raisons de complétude. Comme les systèmes que nous allons regarder ont tous un spectre entièrement discret nous allons nous restreindre dans ce mémoire à la formulation aux valeurs propres. En revanche, il n'est pas inutile de garder toujours en tête qu'une formulation analogue avec les fonctions de Green est toujours possible.

Pour dériver les équations RPA self consistantes à température zéro, nous procédons par analogie et écrivons une transformation générale entre paires d'opérateurs fermioniques particule-trou

$$Q_{\nu}^{\dagger} = \sum_{ph} \left(\mathcal{X}_{ph}^{\nu} a_p^{\dagger} a_h - \mathcal{Y}_{ph}^{\nu} a_h^{\dagger} a_p \right) \quad (14)$$

où p et h correspondent aux états de particule et trou, respectivement, qui sont définis par rapport à l'énergie de Fermi, comme d'habitude. Dans la plupart du temps nous allons travailler, dans ce mémoire, dans la base des ondes planes et dans ce cas p et h réfèrent donc à des vecteurs d'ondes au dessus et en dessous de k_F incluant les indices de spin. Cependant dans le cas général et notamment dans les cas avec symétries brisées, la base dans la quelle sont écrit les opérateurs ph dans (14) doit être trouvée, comme usuellement, par la minimisation de l'énergie du fondamental par rapport à la base dans laquelle sont écrits les indices des opérateurs de fermions. Rappelons aussi que dans ce qui suit, on pourrait également partir de la fonction de Green

$$\mathcal{G}_{k_1 k_2, k'_1 k'_2}^{t-t'} = -i \langle 0|T (a_{k_2}^{\dagger} a_{k_1})(t) (a_{k'_2}^{\dagger} a_{k'_1})(t')|0\rangle \quad (15)$$

et établir tous les résultats qui vont être donnés plus loin.

Comme nous l'avons déjà dit, l'ansatz (14) peut être considéré comme une transformation générale de Hartree–Fock–Bogoliubov entre paires de fermions. Lorsqu'on bosonise les paires de fermions [2], on obtient au plus bas ordre

$$a_p^\dagger a_h \longrightarrow B_{ph}^\dagger \quad \text{et} \quad a_h^\dagger a_p \longrightarrow B_{ph} \quad (16)$$

et à ce moment l'expression (14) devient une transformation HFB entre bosons avec

$$[B, B^\dagger] = 1. \quad (17)$$

Dans notre travail nous n'allons cependant jamais faire appel à un développement bosonique et nous travaillons strictement avec des paires de fermions comme indiqué en (14). A notre avis ceci permet de respecter le principe de Pauli d'une manière beaucoup plus efficace. Nous procédons donc comme auparavant et minimisons l'énergie d'excitation moyenne

$$\Omega_\nu = \frac{\langle 0 | [Q_\nu, [H, Q_\nu^\dagger]] | 0 \rangle}{\langle 0 | [Q_\nu, Q_\nu^\dagger] | 0 \rangle} \quad (18)$$

par rapport aux amplitudes \mathcal{X} et \mathcal{Y} . Bien entendu nous supposons également la relation du vide

$$Q_\nu | 0 \rangle = 0 \quad (19)$$

en dépit du fait que la résolution explicite de cette équation pour la fonction d'onde du fondamental n'est possible que dans des cas particulièrement simples. La minimisation de (18) résultera dans des équations analogues à celles de HFB pour bosons

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A} & \mathcal{B} \\ -\mathcal{B}^* & -\mathcal{A}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{X}^\nu \\ \mathcal{Y}^\nu \end{pmatrix} = \Omega_\nu \begin{pmatrix} \mathcal{X}^\nu \\ \mathcal{Y}^\nu \end{pmatrix} \quad (20)$$

où les éléments

$$\mathcal{A} \propto \langle 0 | [a_h^\dagger a_p, [H, a_{p'}^\dagger a_{h'}]] | 0 \rangle \quad \text{et} \quad \mathcal{B} \propto \langle 0 | [a_h^\dagger a_p, [H, a_{h'}^\dagger a_{p'}]] | 0 \rangle \quad (21)$$

sont des fonctionnelles non-linéaires des amplitudes \mathcal{X} et \mathcal{Y} . En fait les équations (20) ont exactement la même structure mathématique que les équations RPA standard. Notamment il s'ensuit que les solutions $(\mathcal{X}^\nu, \mathcal{Y}^\nu)$ forment une base orthonormée et de ce fait on peut inverser la relation (14), donc exprimer les paires de fermions, $a_p^\dagger a_h$, en fonction des Q_ν^\dagger et Q_ν , c'est à dire

$$a_p^\dagger a_h \propto \sum_\nu (\mathcal{X}_{ph}^{\nu *} Q_\nu^\dagger + \mathcal{Y}_{ph}^\nu Q_\nu) \quad (22)$$

On vérifie aussi directement qu'en partant d'un Hamiltonien avec interaction à deux corps que \mathcal{A} et \mathcal{B} contiennent uniquement des densités de type $\langle a^\dagger a \rangle$ et $\langle a^\dagger a a^\dagger a \rangle$. Ensemble avec la condition (19) et la relation (22), cela nous permettra d'obtenir explicitement les fonctionnelles $\mathcal{A} = \mathcal{A}[\mathcal{X}, \mathcal{Y}]$ et $\mathcal{B} = \mathcal{B}[\mathcal{X}, \mathcal{Y}]$. Comme nous le verrons plus tard, la résolution des équations (20) nous donnera une amélioration par rapport à la RPA standard (qui correspond simplement à une linéarisation des équations (20)) parfois spectaculaire. Voici donc les grandes lignes de notre démarche. Bien entendu les détails sont par endroit assez subtils et nous discuterons et développerons la théorie amplement dans le texte principal en élaborant explicitement des modèles.

Rajoutons à ceci simplement quelques remarques. Ainsi, le concept de la RPA standard est fondé sur la resommation d'une certaine classe de graphes de Feynman (les bulles). Ceci est donc basé sur des arguments perturbatifs et la RPA standard, comme on va le voir explicitement plus tard, n'est certainement plus valable lorsque les corrélations dans le fondamental deviennent trop fortes. Ceci est notamment le cas proche d'une transition de phase. La généralisation de la RPA qui résulte dans la minimisation de la fonctionnelle (18) donne à la RPA un statut non-perturbatif. La seule restriction réside alors dans l'ansatz (14) lui même. Pour aller au delà de la SCRPA, il faudrait alors inclure des opérateurs à 2-corps, 3-corps, etc.. dans l'ansatz (14). Ce schéma d'extension, quoique possible en principe, se heurtera très vite aux limites de résolution numérique. On peut espérer pouvoir inclure dans le futur des opérateurs de type $2p - 2h$ comme $a_{p_1}^\dagger a_{p_2}^\dagger a_{h_1} a_{h_2}$, mais aller au delà semble être trop ambitieux pour des systèmes réalistes.

Avant de conclure cette introduction rappelons qu'il existe une autre RPA, qu'on appelle en physique nucléaire la RPA particule-particule [2]. Au lieu de sommer les bulles ph comme la RPA que nous venons de discuter, elle somme, au contraire, les échelles et a donc à avoir avec la matrice de diffusion de deux Fermions dans un gaz de Fermions. C'est aussi le canal où se manifeste le pôle de Cooper donnant lieu à l'instabilité concernant la transition à la supraconductivité ou à la superfluidité. La fonction de Green correspondante est donnée par

$$\mathcal{G}_{k_1 k_2, k'_1 k'_2}^{t-t'} = -i \langle 0 | T (a_{k_1} a_{k_2})(t) (a_{k'_2}^\dagger a_{k'_1}^\dagger)(t') | 0 \rangle . \quad (23)$$

L'opérateur RPA s'écrit

$$A_{\rho^+}^\dagger = \sum_{p_2 > p_1} \mathcal{X}_{p_1 p_2}^{\rho^+} a_{p_2}^\dagger a_{p_1}^\dagger - \sum_{h_2 > h_1} \mathcal{Y}_{h_1 h_2}^{\rho^+} a_{h_2}^\dagger a_{h_1}^\dagger \quad (24)$$

c'est l'opérateur qui additionne 2-particules au fondamental $|0\rangle$ avec N -particules et nous donne accès aux états,

$$|\rho, N+2\rangle = A_{\rho^+}^\dagger |0\rangle . \quad (25)$$

En dehors de cet opérateur d'addition de 2-particules, il existe aussi un opérateur qui retranche 2-particules,

$$R_{\rho^-}^\dagger = \sum_{h_2 > h_1} \mathcal{X}_{h_1 h_2}^{\rho^-} a_{h_1} a_{h_2} - \sum_{p_2 > p_1} \mathcal{Y}_{p_1 p_2}^{\rho^-} a_{p_1} a_{p_2} . \quad (26)$$

La RPA correspondante donnera les énergies d'excitation dans le système avec $N - 2$ particules. On aboutira aux équations RPA particule-particule ou trou-trou, par analogie avec le canal ph , en minimisant une énergie moyenne

$$\Omega_{\rho^+} = \frac{\langle 0 | [A_{\rho^+}, [H, A_{\rho^+}^+]] | 0 \rangle}{\langle 0 | [A_{\rho^+}, A_{\rho^+}^+] | 0 \rangle} \quad \text{ou} \quad \Omega_{\rho^-} = \frac{\langle 0 | [R_{\rho^-}, [H, R_{\rho^-}^+]] | 0 \rangle}{\langle 0 | [R_{\rho^-}, R_{\rho^-}^+] | 0 \rangle} \quad (27)$$

par rapport aux amplitudes. Avec ceci, on aboutira à des équations RPA self consistantes analogues au cas ph . Nous allons les détailler plus loin en prenant des exemples concrets.

En résumé, nous pouvons dire que l'ansatz (14) permet de calculer les fonctions de corrélations à 1- et 2-corps d'une manière self consistante et non-perturbative. L'inclusion des fonctions de corrélations supérieures doit rester pour le futur. Notre optimisation pour les fonctions de corrélations à 2-corps se traduit d'ailleurs par le fait que les systèmes contenant uniquement 2-particules sont résolus exactement comme on va le voir plus loin. Ceci peut certainement être considéré comme prometteur car habituellement les approches du problème à N-corps se détériorent en considérant un petit nombre de particules.

Chapitre 1

Modèle de pairing multi-niveaux

Dans ce chapitre, nous allons appliquer la SCRPA particule-particule au modèle d'appariement multicouches. Ce modèle a déjà été traité en *pp*-SCRPA précédemment par Dukelsky et Schuck [19, 21] mais pour nous familiariser avec le formalisme, nous avons refait le calcul. Comme ce modèle est particulièrement instructif et transparent en ce qui concerne l'application du formalisme SCRPA, nous tenons ici à le présenter pour faciliter plus loin la compréhension du traitement en SCRPA du modèle de Hubbard.

1.1 Modèle de pairing multi-niveaux

Le modèle de pairing multi-niveaux ou "Picket Fence Model" a été introduit par Richardson en 1966 [22] pour décrire les noyaux déformés et superfluides. L'avantage de ce modèle réside dans le fait qu'on peut calculer la solution exacte pour un nombre pratiquement arbitraire de niveaux. Cependant, après plusieurs considérations en physique nucléaire [23], le modèle n'a pas été bien exploité. Probablement, il a été jugé comme un candidat trop réduit pour la description d'un noyau réel. Cependant, le modèle contient beaucoup d'informations physiques intéressantes ce qui a été exploré récemment pour les grains métalliques supraconducteurs ultra-petits [24]. L'un des aspects intéressants de ce modèle est que la solution exacte révèle une transition entre un régime superfluide (ou supraconducteur) et un état normal qui est complètement continue, c'est à dire il n'y a pas de signe d'une transition de phase brusque d'un état à un autre en fonction des paramètres du système [25].

L'hamiltonien du modèle est donné par

$$H = \sum_{i=1}^{\Omega} (\varepsilon_i - \mu) N_i - G \sum_{i,j=1}^{\Omega} P_i^{\dagger} P_j , \quad (1.1)$$

avec

$$N_i = c_i^\dagger c_i + c_{-i}^\dagger c_{-i}, \quad P_i^\dagger = c_i^\dagger c_{-i}^\dagger, \quad (1.2)$$

où c_i^\dagger crée une particule dans le i -ème niveau avec $S = \frac{1}{2}$ et $m = \frac{1}{2}$ et c_{-i}^\dagger avec $m = -\frac{1}{2}$. Les états $+i$ et i sont deux états opposés par rapport à l'inversion du temps. Ω est le nombre total de niveaux, G est la valeur attractive de l'interaction de deux paires qui diffuse les fermions par paires et $\varepsilon_i = i \varepsilon$ (voir Fig. 1.1). Le potentiel chimique μ est défini de telle sorte que l'hamiltonien conserve la symétrie particule-trou. On suppose que le système est demi-plein avec un nombre de paires $N = \Omega/2$. Chaque niveau est 2-fois dégénéré (dégénérescence de Kramers).

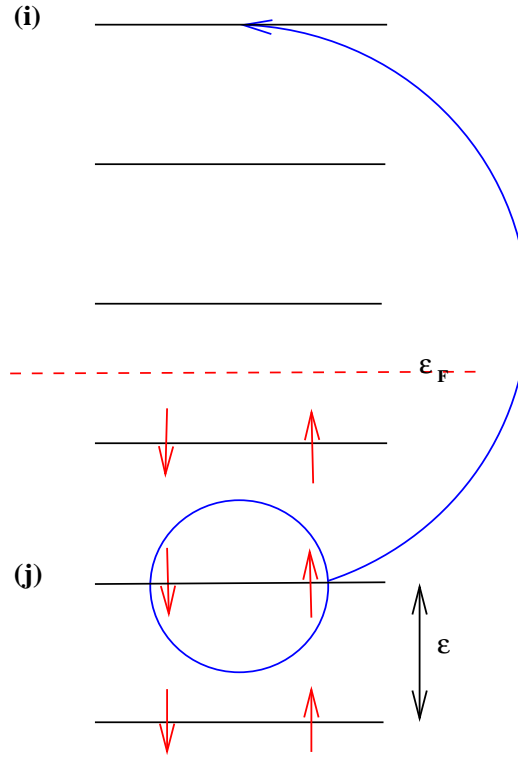


FIG. 1.1 – Schéma de niveaux pour le modèle de pairing multi-niveaux .

Les états de particules (p) et de trous (h) sont définis par

$$N_h|HF\rangle = 2, \quad N_p|HF\rangle = 0, \quad (1.3)$$

où, nous appelons $|HF\rangle$ l'état fondamental de l'hamiltonien (1.1) avec $G = 0$. Les états de particules p correspondent à $\varepsilon_i > \mu$ et ceux de trous h à $\varepsilon_i < \mu$ (voir Fig. 1.1). A ce moment, on doit réécrire l'hamiltonien avec la symétrie particule-trou.

1.2 Symétrie particule–trou de l'hamiltonien

Les relations de commutations entre les opérateurs définis dans le paragraphe précédent (1.1) sont

$$\left[P_i, P_j^\dagger \right] = \delta_{ij} (1 - N_i) , \quad \left[N_i, P_j^\dagger \right] = 2\delta_{ij} P_j^\dagger , \quad \left[N_i, P_j \right] = -2\delta_{ij} P_j . \quad (1.4)$$

Pour rendre la symétrie particule–trou explicite, on introduit la transformation suivante

$$c_p = b_p , \quad c_{-p} = b_{-p} , \quad c_h = b_{-h}^\dagger , \quad c_{-h} = -b_h^\dagger . \quad (1.5)$$

Ainsi, on définit les nouveaux opérateurs M , K et K^\dagger par

$$N_h = 2 - M_h , \quad N_p = M_p , \quad P_h^\dagger = -K_h , \quad P_p^\dagger = K_p^\dagger \quad (1.6)$$

avec leurs relations de commutations

$$\begin{aligned} \left[K_p, K_{p'}^\dagger \right] &= \delta_{pp'} (1 - M_p) , & \left[M_p, K_{p'}^\dagger \right] &= 2\delta_{pp'} K_p^\dagger , & \left[M_p, K_{p'} \right] &= -2\delta_{pp'} K_p , \\ \left[K_h, K_{h'}^\dagger \right] &= \delta_{hh'} (1 - M_h) , & \left[M_h, K_{h'}^\dagger \right] &= 2\delta_{hh'} K_h^\dagger , & \left[M_h, K_{h'} \right] &= -2\delta_{hh'} K_h . \end{aligned} \quad (1.7)$$

Les énergies à une particule sont $\varepsilon_p = \varepsilon(N + p)$ et $\varepsilon_h = \varepsilon(N - h + 1)$, avec $p, h = 1, \dots, N$ et $N = \frac{\Omega}{2}$. Les particules (p) et les trous (h) sont dénombrés en commençant à partir du niveau occupé le plus proche de celui du niveau de Fermi. On utilise un potentiel chimique afin de restorer la symétrie ph :

$$\mu = \varepsilon \left(N + \frac{1}{2} \right) - \frac{G}{2} . \quad (1.8)$$

avec cette définition l'hamiltonien se réduit à

$$\begin{aligned} H &= -\varepsilon N^2 + \sum_{p=h=1}^N \left[\varepsilon \left(p - \frac{1}{2} \right) + \frac{G}{2} \right] (M_p + M_h) \\ &\quad - G \sum_{pp'} K_p^\dagger K_{p'} - G \sum_{hh'} K_h^\dagger K_{h'} + G \sum_{ph} \left(K_p^\dagger K_h^\dagger + K_p K_h \right) . \end{aligned} \quad (1.9)$$

Manifestement, dans cette forme, on a une symétrie complète entre les états de particules et de trous. Ceci facilite beaucoup la tâche formelle et numérique de l'application de la théorie RPA dans le canal particule–particule.

1.3 Application du formalisme RPA particule–particule

Les ingrédients de base de la théorie SCRPA dans le canal particule–particule sont les deux opérateurs, tels que l'opérateur d'addition de deux particules

$$A_\rho^\dagger = \sum_p \mathcal{X}_p^\rho \bar{K}_p^\dagger - \sum_h \mathcal{Y}_h^\rho \bar{K}_h , \quad (1.10)$$

et l'opérateur de retranchement de deux particules

$$R_\lambda^\dagger = - \sum_p \mathcal{Y}_p^\lambda \overline{K}_p + \sum_h \mathcal{X}_h^\lambda \overline{K}_h^\dagger, \quad (1.11)$$

où $\overline{K}_p = K_p / \sqrt{1 - \langle M_p \rangle}$ et $\overline{K}_h = K_h / \sqrt{1 - \langle M_h \rangle}$. Comme expliqué dans l'introduction, nous suivons la dérivation de Baranger pour les équations de mouvements du champ moyen à une particule [17]. Ainsi, on définit une énergie d'excitation moyenne comme

$$\begin{aligned} \Omega_\rho = & \left\{ \sum_{\alpha(N+2)} (E_{N+2}^\alpha - E_{N+2}^0) |\langle \alpha | A_\rho^\dagger | 0 \rangle|^2 + \sum_{\beta(N-2)} (E_{N-2}^\beta - E_{N-2}^0) |\langle \beta | A_\rho | 0 \rangle|^2 \right. \\ & \left. + 2\mu^{(+)} \sum_\alpha |\langle \alpha | A_\rho^\dagger | 0 \rangle|^2 - 2\mu^{(-)} \sum_\beta |\langle \beta | A_\rho | 0 \rangle|^2 \right\} \\ & \left\{ \sum_{\alpha(N+2)} |\langle \alpha | A_\rho^\dagger | 0 \rangle|^2 - \sum_{\beta(N-2)} |\langle \beta | A_\rho | 0 \rangle|^2 \right\}^{-1}, \end{aligned} \quad (1.12)$$

où $2\mu^{(\pm)} = (\pm)\frac{1}{2}(E_{N+/-2}^0 - E_N^0)$ sont les potentiels chimiques, $E_N^{\alpha,\beta}$ sont, en principe, les valeurs propres exactes de H et $|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |0\rangle$ les états propres exacts.

L'expression (1.12) peut être considérée comme la moyenne de l'énergie d'excitation en faisant intervenir les deux spectres des deux systèmes $N + 2$ et $N - 2$ particules, respectivement. On peut réécrire aussi l'expression (1.12) comme

$$\Omega_\rho = \frac{\langle 0 | [A_\rho, [H, A_\rho^\dagger]] | 0 \rangle}{\langle 0 | [A_\rho, A_\rho^\dagger] | 0 \rangle}, \quad (1.13)$$

qui représente, par analogie avec le canal ph , la règle de somme pondérée par l'énergie. Nous introduisons les deux potentiels chimiques $\mu^{(\pm)}$ en (1.12) dans le but de définir correctement l'origine du spectre des énergies d'excitations. Dans le cas où on suppose que $\mu^{(+)} \simeq \mu^{(-)}$, on a

$$\Omega_\rho - 2\mu = \frac{\sum_\alpha (E_{N+2}^\alpha - E_{N+2}^0) |\langle \alpha | A_\rho^\dagger | 0 \rangle|^2 + \sum_\beta (E_{N-2}^\beta - E_{N-2}^0) |\langle \beta | A_\rho | 0 \rangle|^2}{\langle 0 | [A_\rho, A_\rho^\dagger] | 0 \rangle}. \quad (1.14)$$

ce qui illustre parfaitement ce que nous venons de dire. La minimisation de l'énergie à deux particules (1.12) relativement aux amplitudes \mathcal{X} et \mathcal{Y} , nous amène au système d'équations suivant:

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A} & \mathcal{B} \\ -\mathcal{B} & \mathcal{C} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{X} \\ \mathcal{Y} \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} \mathcal{X} \\ \mathcal{Y} \end{pmatrix}, \quad (1.15)$$

avec

$$\mathcal{A}_{pp'} = \langle 0 | [\overline{K}_p, [H, \overline{K}_{p'}^\dagger]] | 0 \rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \delta_{pp'} \left\{ 2 \left(\epsilon(p - \frac{1}{2}) + \frac{G}{2} \right) + 2 \frac{G}{1 - \langle M_p \rangle} \left\langle \left(\sum_{p_1} K_{p_1}^\dagger - \sum_{h_1} K_{h_1} \right) K_p \right\rangle \right\} \\
&\quad - G \frac{\langle (1 - M_p)(1 - M_{p'}) \rangle}{\sqrt{(1 - \langle M_p \rangle)(1 - \langle M_{p'} \rangle)}} , \\
\mathcal{B}_{ph} &= -\langle 0 | [\overline{K}_p, [H, \overline{K}_h]] | 0 \rangle = G \frac{\langle (1 - M_p)(1 - M_h) \rangle}{\sqrt{(1 - \langle M_p \rangle)(1 - \langle M_h \rangle)}} , \tag{1.16}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{C}_{hh'} &= \langle 0 | [\overline{K}_h, [H, \overline{K}_{h'}^\dagger]] | 0 \rangle \\
&= \delta_{hh'} \left\{ -2 \left(\epsilon(h - \frac{1}{2}) + \frac{G}{2} \right) - 2 \frac{G}{1 - \langle M_h \rangle} \left\langle K_h^\dagger \left(- \sum_{p_1} K_{p_1}^\dagger + \sum_{h_1} K_{h_1} \right) \right\rangle \right\} \\
&\quad + G \frac{\langle (1 - M_h)(1 - M_{h'}) \rangle}{\sqrt{(1 - \langle M_h \rangle)(1 - \langle M_{h'} \rangle)}} .
\end{aligned}$$

A cause de la symétrie particule-trou, le mode de retranchement à deux particules satisfait exactement au même système d'équations, ce qui implique que les deux modes ont exactement les mêmes énergies et les mêmes fonctions d'ondes. A partir de cette conclusion, on donne les relations suivantes :

$$\begin{aligned}
\langle M_p \rangle &= \langle M_{h=p} \rangle , \\
\langle K_p^\dagger K_{p'} \rangle &= \langle K_{h=p}^\dagger K_{h'=p'} \rangle , & \langle K_h K_p \rangle &= \langle K_p^\dagger K_h^\dagger \rangle \\
\langle M_p M_{p'} \rangle &= \langle M_{h=p} M_{h'=p'} \rangle , & \langle M_h M_p \rangle &= \langle M_{h'=p} M_{p'=h} \rangle ,
\end{aligned} \tag{1.17}$$

qui sont consistantes avec les equations (1.16) et ce que signifie

$$\mathcal{X}_p^\rho = \pm \mathcal{X}_{h=p}^{\lambda=\rho}, \quad \mathcal{Y}_h^\rho = \pm \mathcal{Y}_{p=h}^{\lambda=\rho} . \tag{1.18}$$

Les amplitudes \mathcal{X} et \mathcal{Y} obeissent aux conditions de normalisation

$$\begin{aligned}
\sum_p \mathcal{X}_p^\rho \mathcal{X}_p^{\rho'} - \sum_h \mathcal{Y}_h^\rho \mathcal{Y}_h^{\rho'} &= \delta_{\rho\rho'} , \\
\sum_h \mathcal{X}_h^\lambda \mathcal{X}_h^{\lambda'} - \sum_p \mathcal{Y}_p^\lambda \mathcal{Y}_p^{\lambda'} &= \delta_{\lambda\lambda'} , \\
\sum_p \mathcal{X}_p^\rho \mathcal{Y}_p^\lambda - \sum_h \mathcal{X}_h^\lambda \mathcal{Y}_h^\rho &= 0 ,
\end{aligned} \tag{1.19}$$

et de fermeture

$$\begin{aligned}
\sum_\rho \mathcal{X}_p^\rho \mathcal{X}_{p'}^\rho - \sum_\lambda \mathcal{Y}_p^\lambda \mathcal{Y}_{p'}^\lambda &= \delta_{pp'} , \\
\sum_\lambda \mathcal{X}_h^\lambda \mathcal{X}_{h'}^\lambda - \sum_\rho \mathcal{Y}_h^\rho \mathcal{Y}_{h'}^\rho &= \delta_{hh'} , \\
\sum_\lambda \mathcal{X}_h^\lambda \mathcal{Y}_p^\lambda - \sum_\rho \mathcal{X}_p^\rho \mathcal{Y}_h^\rho &= 0 .
\end{aligned} \tag{1.20}$$

En plus, les valeurs moyennes des commutateurs suivants sont données par

$$\begin{aligned} \langle [R_\lambda, R_{\lambda'}^\dagger] \rangle &= \delta_{\lambda\lambda'} , & \langle [A_\rho, A_{\rho'}^\dagger] \rangle &= \delta_{\rho\rho'} , \\ \langle [A_\rho^\dagger, R_\lambda] \rangle &= \langle [A_\rho, R_\lambda] \rangle = [R_\lambda, A_\rho^\dagger] = 0 . \end{aligned} \quad (1.21)$$

A l'aide de ces équations on peut inverser (1.10) et (1.11) comme

$$\begin{aligned} K_p^\dagger &= \sqrt{1 - \langle M_p \rangle} \left[\sum_\rho \mathcal{X}_p^\rho A_\rho^\dagger + \sum_\lambda \mathcal{Y}_p^\lambda R_\lambda \right] , \\ K_h &= \sqrt{1 - \langle M_h \rangle} \left[\sum_\lambda \mathcal{X}_h^\lambda R_\lambda + \sum_\rho \mathcal{Y}_h^\rho A_\rho^\dagger \right] . \end{aligned} \quad (1.22)$$

Comme l'on a déjà signalé, on suppose que l'état du vide est équivalent à l'état SCRPA, $|0\rangle \equiv |RPA\rangle$, tel que

$$A_\rho |RPA\rangle = R_\lambda |RPA\rangle = 0. \quad (1.23)$$

Les valeurs moyenne en (1.16) sont alors évaluées avec cet état fondamental et ce qui nous permettra de fermer notre système d'équations. Ainsi avec (1.22), on peut calculer les valeurs moyennes suivantes

$$\begin{aligned} \langle K_p^+ K_{p'}^- \rangle &= \sqrt{(1 - \langle M_p \rangle)(1 - \langle M_{p'} \rangle)} \sum_\lambda \mathcal{Y}_p^\lambda \mathcal{Y}_{p'}^\lambda , \\ \langle K_h^+ K_{h'}^- \rangle &= \sqrt{(1 - \langle M_h \rangle)(1 - \langle M_{h'} \rangle)} \sum_\rho \mathcal{Y}_h^\rho \mathcal{Y}_{h'}^\rho , \\ \langle K_p^+ K_h^+ \rangle &= \langle K_h^- K_p^- \rangle = \sqrt{(1 - \langle M_h \rangle)(1 - \langle M_p \rangle)} \sum_\lambda \mathcal{X}_p^\lambda \mathcal{Y}_h^\lambda , \\ \langle K_h^+ K_p^- \rangle &= \langle K_p^+ K_h^- \rangle = 0 . \end{aligned} \quad (1.24)$$

En plus, pour une algèbre $SU2$ qui vérifie les relations de commutations (1.7) pour un spin- $\frac{1}{2}$, on a la relation de Casimir,

$$\frac{1}{2} \left(K_i^- K_i^+ + K_i^+ K_i^- \right) + \left(K_i^0 \right)^2 = (\mathbf{K}_i)^2 , \quad (1.25)$$

ce qui nous donne (on ne fait pas la différence entre indice de particule et de trou)

$$K_i^- K_i^+ + K_i^+ K_i^- = 1 \quad (1.26)$$

car $(K_i^0)^2 = \frac{1}{4}$ et $(\mathbf{K}_i)^2 = \frac{3}{4}$. Ceci implique

$$M_i = 2 K_i^+ K_i^- \quad (1.27)$$

et nous obtenons donc pour les nombres d'occupation la relation suivante

$$\langle M_i \rangle = 1 - \langle -2 K_i^0 \rangle = 1 - \frac{1}{1 + 2 \sum_\rho (\mathcal{Y}_i^\rho)^2} \quad (1.28)$$

Connaissant toutes ces valeurs moyennes, nous pouvons évaluer l'énergie fondamentale SCRPA qui est donnée par la valeur moyenne de l'hamiltonien dans l'état RPA:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle = & -\varepsilon N^2 + \sum_{p=h=1}^N \left[\varepsilon \left(p - \frac{1}{2} \right) + \frac{G}{2} \right] (\langle M_p \rangle + \langle M_h \rangle) \\ & - G \sum_{pp'} \langle K_p^\dagger K_{p'} \rangle - G \sum_{hh'} \langle K_h^\dagger K_{h'} \rangle + G \sum_{ph} \left(\langle K_p^\dagger K_h^\dagger \rangle + \langle K_p K_h \rangle \right) . \end{aligned} \quad (1.29)$$

Ainsi l'énergie de corrélation SCRPA est donnée par

$$E_{corr} = \langle H \rangle + \varepsilon N^2. \quad (1.30)$$

Par comparaison, pour l'énergie de corrélation RPA standard, on a [2]

$$E_{corr}^{RPA} = - \sum_{\rho} \mathcal{E}_{\rho} \sum_p |\mathcal{Y}_p^{\rho}|^2. \quad (1.31)$$

Enfin, pour fermer le système d'équations SCRPA, on doit exprimer les fonctions de corrélations de type $\langle M_i M_j \rangle$ en fonction des amplitudes RPA. Pour trouver ces valeur moyenne, on a une relation exacte pour $i = j$

$$M_i M_i = 2 M_i. \quad (1.32)$$

Il est aussi simple de montrer que pour $i \neq j$

$$\begin{aligned} M_{p_i} M_{p_j} &= 4 K_{p_i}^\dagger K_{p_j}^\dagger K_{p_j} K_{p_i} , \\ M_{p_i} M_{h_j} &= M_{p_i} + M_{h_j} - 2 K_{p_i}^\dagger K_{h_j} K_{h_j}^\dagger K_{p_i} - 2 K_{h_j}^\dagger K_{p_i} K_{p_i}^\dagger K_{h_j} , \\ M_{h_i} M_{h_j} &= 4 K_{h_i}^\dagger K_{h_j}^\dagger K_{h_j} K_{h_i} . \end{aligned} \quad (1.33)$$

ce qui nous donne l'équation aux valeurs moyennes dans l'état RPA

$$\begin{aligned} \langle M_{p_i} M_{p_j} \rangle &= 4(1 - \langle M_{p_i} \rangle)(1 - \langle M_{p_j} \rangle) \sum_{\lambda_0 \lambda_3} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \mathcal{Y}_{p_i}^{\lambda_0} \mathcal{Y}_{p_i}^{\lambda_3} \mathcal{Y}_{p_j}^{\lambda_1} \mathcal{Y}_{p_j}^{\lambda_2} \langle R_{\lambda_0} R_{\lambda_1} R_{\lambda_2}^\dagger R_{\lambda_3}^\dagger \rangle , \\ \langle M_{p_i} M_{h_j} \rangle &= \langle M_{p_i} \rangle + \langle M_{h_j} \rangle \\ &\quad - 2(1 - \langle M_{p_i} \rangle)(1 - \langle M_{h_j} \rangle) \sum_{\lambda_0 \lambda_3} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \mathcal{Y}_{p_i}^{\lambda_0} \mathcal{Y}_{p_i}^{\lambda_3} \mathcal{X}_{h_j}^{\lambda_1} \mathcal{X}_{h_j}^{\lambda_2} \langle R_{\lambda_0} R_{\lambda_1} R_{\lambda_2}^\dagger R_{\lambda_3}^\dagger \rangle \\ &\quad - 2(1 - \langle M_{p_i} \rangle)(1 - \langle M_{h_j} \rangle) \sum_{\rho_0 \rho_3} \sum_{\rho_1 \rho_2} \mathcal{Y}_{h_j}^{\rho_0} \mathcal{Y}_{h_j}^{\rho_3} \mathcal{X}_{p_i}^{\rho_1} \mathcal{X}_{p_i}^{\rho_2} \langle A_{\rho_0} A_{\rho_1} A_{\rho_2}^\dagger A_{\rho_3}^\dagger \rangle , \\ \langle M_{h_i} M_{h_j} \rangle &= 4(1 - \langle M_{h_i} \rangle)(1 - \langle M_{h_j} \rangle) \sum_{\rho_0 \rho_3} \sum_{\rho_1 \rho_2} \mathcal{Y}_{h_i}^{\rho_0} \mathcal{Y}_{h_i}^{\rho_3} \mathcal{Y}_{h_j}^{\rho_1} \mathcal{Y}_{h_j}^{\rho_2} \langle A_{\rho_0} A_{\rho_1} A_{\rho_2}^\dagger A_{\rho_3}^\dagger \rangle . \end{aligned} \quad (1.34)$$

En commutant en (1.34) les destructeurs R , A à droite, ce qui fait apparaître des valeurs moyennes du type $\langle MM \rangle$, on aboutit à un système linéaire d'équations pour ces derniers qu'on peut résoudre. Le système d'équations SCRPA est alors complètement fermé sans aucune entrave au formalisme. Pour le calcul de ces fonctions de corrélations qui apparaissent dans l'équation (1.34), on donne le détail dans l'annexe (A.2).

1.4 Discussion des résultats pour $\Omega = 10$

Nous présentons les résultats obtenus par la SCRPA pour un nombre de niveaux $\Omega = 10$ et ça pour l'énergie de corrélation et des états excités en fonction de la constante du couplage G et en les comparant à la solution exacte avec $\epsilon = 1$ (voir Fig. 1.2 et Fig. 1.3).

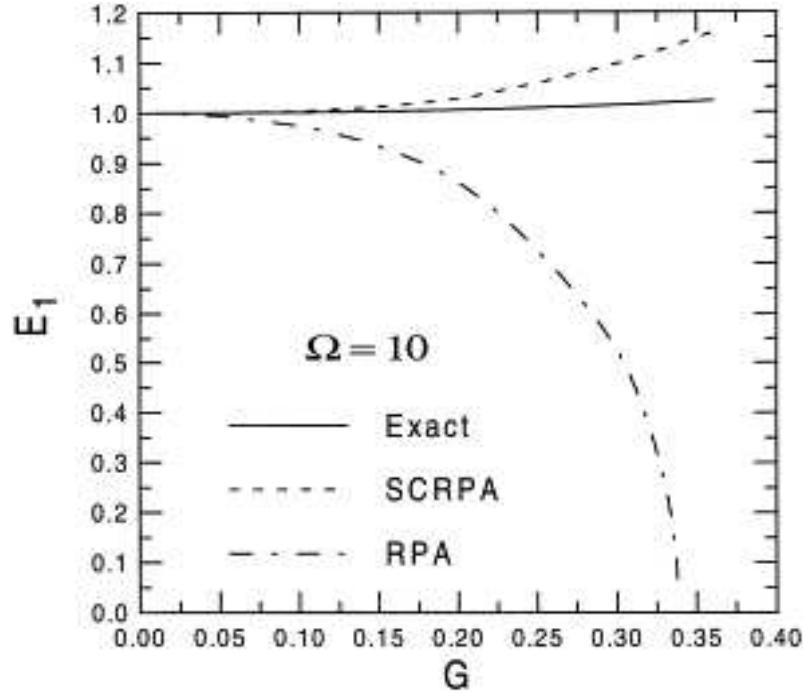


FIG. 1.2 – La différence des énergies fondamentales des deux systèmes $\Omega = 10$, $N = 12$ et $\Omega = N = 10$.

On remarque que l'énergie du premier état excité RPA standard tend vers zéro lorsque $G \rightarrow 0.33$. Elle se présente comme une fonction décroissante en fonction de G , alors que la solution exacte est une fonction croissante. La RPA standard traduit le fait que le système reste attractif alors que la solution exacte et aussi la SCRPA montre que le système devient répulsif ce qui se traduit par la pente positive de E_1 et E_2 . Ceci est dû à la forte influence du principe d'exclusion de Pauli dans ce système qui renverse le signe de l'interaction entre les paires de particules. On voit que la SCRPA reproduit bien la solution exacte qualitativement et quantitativement du fait qu'elle donne une pente positive comme celle exacte alors que la RPA standard est complètement fausse. De même pour l'énergie du fondamental, elle donne un bon résultat par rapport à l'exact et elle dépasse le point de transition de phase à la superfluidité qui se produit en champ moyen et avec la RPA

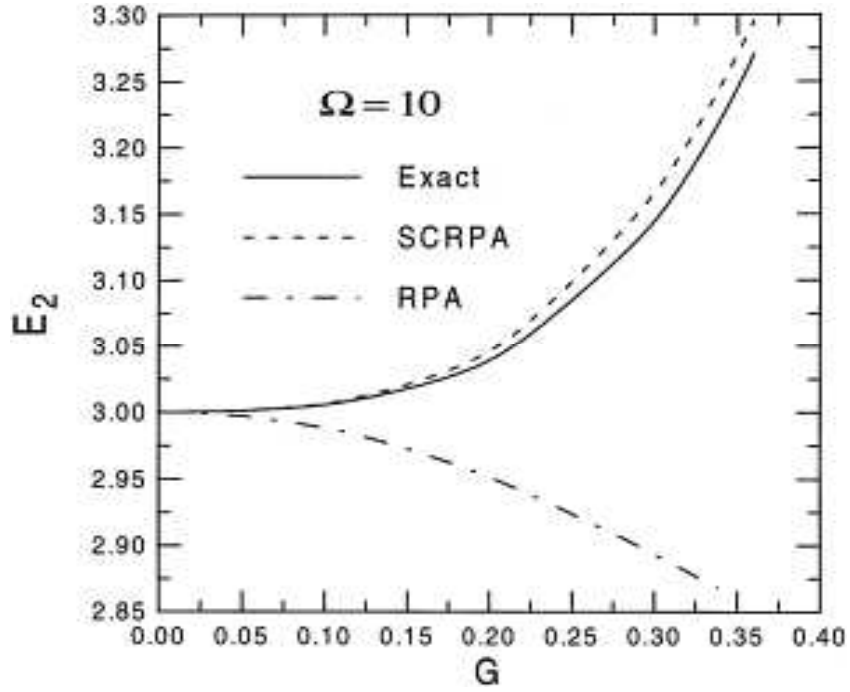


FIG. 1.3 – L'énergie du premier état excité du système avec $\Omega = 10$ et $N = 12$ relativement au système avec $\Omega = 10$ et $N = 12$.

standard (voir Fig. 1.4) pour $G_c = 0.33$. Il n'est pas étonnant que la SCRPA s'arrête à converger à une valeur de $G \geq G_c$ parce qu'elle commence à ressentir l'effet de la base du fait qu'on utilise la base qui conserve la symétrie (qu'on l'appelle "base sphérique"). A ce moment, il faudrait qu'on travaille dans la base qui brise la symétrie, c-à-d la base des quasiparticules (BCS). On représente également l'énergie du fondamental en fonction du nombre de niveaux Ω (voir Fig. 1.5). On remarque que la SCRPA donne de bons résultats par rapport à la RPA standard pour une valeur intermédiaire de l'interaction $G = 0.21$. On peut aussi signaler que la SCRPA a été généralisée à température finie et appliquée à ce modèle et elle a produit également de très bons résultats [26].

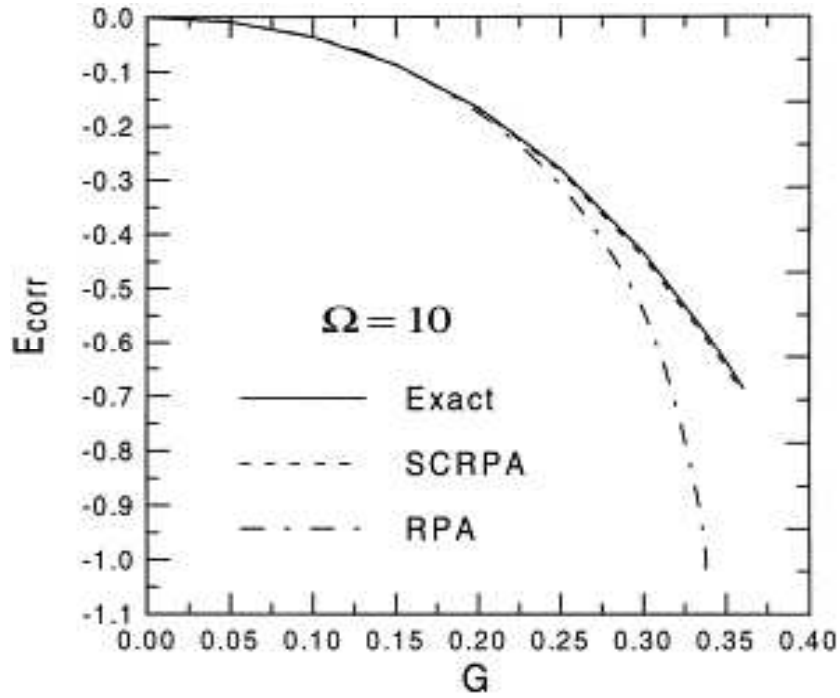


FIG. 1.4 – L'énergie de corrélation du fondamental pour le système à $\Omega = 10$ en fonction de l'interaction de paire G .

1.5 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons illustré le formalisme SCRPA sur le modèle d'appariement multicouches (modèle de Richardson ou "Picket Fence Model"). Ce modèle est non trivial dans le sens qu'il n'est plus diagonalisable avec des méthodes simples à partir d'un certain nombre de niveaux. Cependant, avec la méthode de Richardson, on peut trouver la solution exacte même pour un très grand nombre de niveaux. La pp -SCRPA a pu être appliquée à ce modèle sans problème et sans entrave au formalisme. Les résultats obtenus sont en excellent accord avec les résultats exacts à $T = 0$ et à $T \neq 0$. Ces résultats encourageants nous ont motivés pour appliquer ce formalisme sur un modèle plus compliqué tel que le modèle de Hubbard.

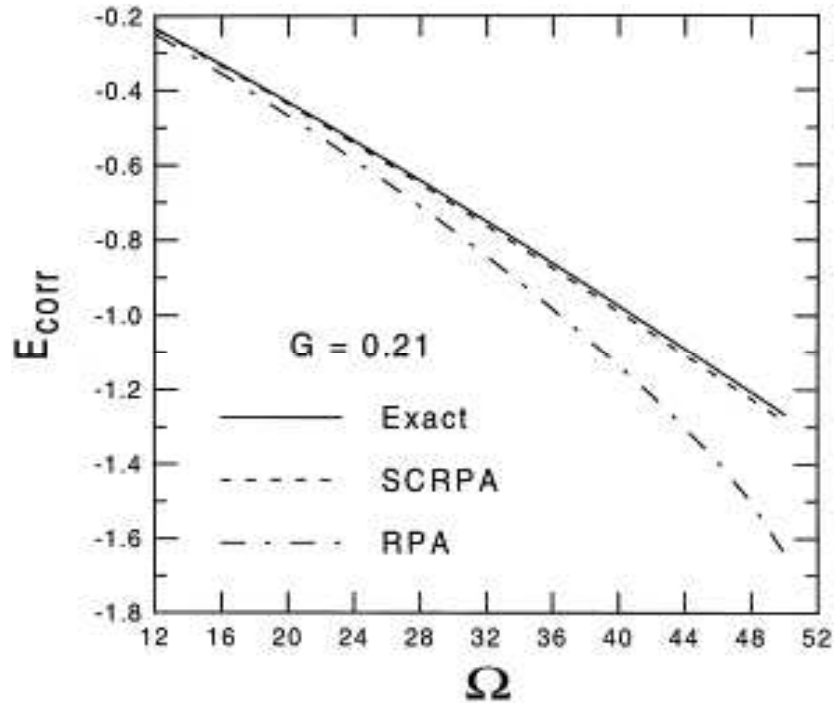


FIG. 1.5 – L'énergie de corrélation du fondamental en fonction du nombre de niveaux Ω pour $G = 0.21$.

Chapitre 2

Modèle de Hubbard

Le modèle de Hubbard est l'un des modèles les plus répandus en physique d'électrons fortement corrélés. Il fournit probablement la description quantique la plus simple incluant le mouvement des électrons et leurs interactions mutuelles sur réseau. En dépit de cette simplicité structurelle, des résultats exacts sont seulement connus dans des conditions très particulières, par exemple à une dimension [27]. Depuis son introduction par Hubbard jusqu'à nos jours, ce modèle a ainsi représenté un défi énorme, stimulant la recherche de nouvelles méthodes à N -corps. Nous commencerons ce chapitre en expliquant le lien entre le problème électronique dans un solide réaliste et le modèle de Hubbard. Ensuite, nous passerons à l'application du formalisme RPA sur le modèle de Hubbard à deux sites.

2.1 Lien avec le problème électronique d'un solide réaliste

Une description générale d'un solide doit, en principe, inclure le mouvement des noyaux et des électrons, ainsi que l'interaction des noyaux entre eux, des électrons entre eux, et l'interaction entre noyaux et électrons. C'est un problème à N corps extrêmement complexe, non seulement insoluble exactement, mais qui représente une tâche insurmontable dans sa totalité pour les méthodes approximatives. Une théorie générale devrait expliquer des effets aussi différents que la formation des atomes ou des ions, leur condensation dans l'état solide avec les divers structures amorphes et cristallines, les phénomènes magnétiques et électriques, qui, eux, possèdent des aspects aussi variés que le comportement diélectrique, l'ordre magnétique, la transition métal-isolant et la supraconductivité.

Nous sommes donc invités à estimer les différentes échelles d'énergie impliquées dans ces phénomènes. En physique des solides, on s'intéresse aux propriétés magnétiques et électriques. Elles sont créées par les couches externes des atomes qui ne sont remplies d'électrons qu'en partie et dont l'énergie de liaison atteint l'ordre de 10 électron-Volts

(eV). Leur influence sur les électrons des couches internes, qui, eux, sont liés au noyau avec une énergie de quelques dizaines de keV, est très faible. Nous pouvons, par conséquent, nous limiter à décrire un système composé d'électrons et d'ions.

Dans ce système, la condensation dans l'état solide est le processus dominant. Les énergies typiques sont de quelques eV. En chimie inorganique, l'arrangement exact des ions est généralement déterminé par la composition chimique, c.à.d. la stœchiométrie, et par la thermodynamique (pression, température, etc.). Après la condensation, les ions sont fixés sur leurs positions d'équilibre, hormis de petites oscillations autour de ces dernières. Dans un réseau cristallin, les quanta de ces oscillations s'appellent *phonons*.

Si nous nous intéressons au comportement du solide à température ambiante ($300\text{ K} \approx 30\text{ meV}$), voir basse ($1\text{ K} \approx 0.1\text{ meV}$), la structure cristalline reste fixe. Il suffit alors d'analyser le comportement des électrons des couches extérieures. Dans l'approximation la plus simple, des électrons indépendants évoluent dans le potentiel périodique des ions. Leurs fonctions d'onde sont caractérisées par un indice de bande provenant des nombres quantiques de l'atome isolé. De plus, la fonction d'onde possède une quantité de mouvement. Suite à la périodicité du problème, cette *impulsion de Bloch* ne peut prendre que des valeurs de la première zone de Brillouin. Nous nous retrouvons avec un gaz de Fermi sur réseau, pour lequel les fonctions de Bloch représentent, en quelque sorte, les ondes planes. La diagonalisation numérique de l'hamiltonien des électrons indépendants est appelé "calcul de structure des bandes". L'influence du potentiel des ions se manifeste alors dans les énergies à une particule, qu'on appelle *bandes d'énergie*.

On peut améliorer ces calculs si l'on tient compte du fait que l'interaction entre les électrons modifie les bandes d'énergie. Au premier ordre, on n'inclut que la contribution classique de cette interaction qui est la répulsion coulombienne entre les électrons: c'est l'approximation de Hartree, qui, pour un cristal réaliste, pose déjà un problème numérique considérable.

Une fois que la structure des bandes est déterminée, nous pouvons nous occuper des phénomènes engendrés par la partie corrélée de l'interaction entre les électrons. La version la plus simple de ce problème purement électronique est réalisé dans le *modèle de Hubbard*. Dans ce prototype, les électrons se propagent dans une seule bande d'énergie. Les autres bandes sont supposées être suffisamment loin de l'énergie de Fermi pour qu'elles n'interviennent pas dans nos considérations. Une seconde hypothèse concerne l'interaction électron-électron: dans le modèle de Hubbard, elle est réduite à une répulsion entre les électrons se trouvant sur le "même site" du réseau cristallin. Nous entendons par là que les deux électrons se trouvent dans le même état de Wannier. Ces fonctions d'onde centrées autour d'un ion précis sont parfois mieux adaptées que les fonctions de Bloch pour la

description des phénomènes locaux.

L'hamiltonien de Hubbard [28] est donnée par :

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \quad (2.1)$$

Les opérateurs $c_{i\sigma}^{\dagger}$ et $c_{i\sigma}$, respectivement, créent et annihilent un électron de spin σ dans l'état de Wannier centré autour du site i . L'opérateur de nombre de particules au site i est défini par $\hat{n}_{i\sigma} = c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}$. Le premier terme de (2.1) décrit la propagation des électrons: le potentiel cristallin ne permet que des transitions directes entre des sites i et j pour lesquelles les éléments de matrice t_{ij} sont non nuls. Le second terme tient compte de l'interaction: si deux électrons se trouvent sur le même site i , ils se repoussent avec l'énergie coulombienne U .

Ce modèle semble être une caricature du problème électronique d'un solide réaliste. Malgré ces sévères simplification, son diagramme de phases est extrêmement riche, et, jusqu'à présent, seulement partiellement compris: au niveau Hartree-Fock, il offre une multitude de phases magnétiques, métalliques et isolantes. Pour des interactions attractives, on observe un "crossover" entre une phase supraconductrice et un régime de condensation de Bose-Einstein [29, 30]. Cette richesse explique que, plus de quarante ans après son introduction, le débat sur beaucoup de ses propriétés principales n'est pas encore clos. Une solution exacte pour le modèle de Hubbard n'a pu être trouvée et n'existe probablement qu'à une dimension [27].

Nous renvoyons le lecteur s'intéressant plus précisément aux origines et à la dérivation de ce modèle aux travaux originaux de Hubbard [28, 31, 32] et d'Anderson [33], ou à des ouvrages plus récents comme, par exemple, les réfs. [34, 35, 36]. En soulignant qu'il n'existe presque aucun solide réel qui corresponde aux suppositions incorporées dans le modèle de Hubbard. Il doit plutôt être considéré comme un modèle standard pour les systèmes à électrons fortement corrélés, représentant ainsi un ingrédient important pour les modèles plus réalistes [34].

Tout le long de notre étude, nous considérerons une chaîne unidimensionnelle avec les conditions aux limites périodiques. $N = 2$ pour le cas à deux sites, $N = 4$ pour le cas à quatre sites et $N = 6$ pour le cas à six sites. Mathématiquement, le système est équivalent à un problème fini ce qui nous permet de tester nos approximations, principalement la RPA auto-cohérente. En plus, pour étudier l'apport des corrélations pour chacune des approximations utilisées, on doit extraire la partie Hartree-Fock (HF) qui décrit des quasi-particules libres. Pour cela, on introduira l'approximation HF relativement au modèle de Hubbard.

2.2 Modèle de Hubbard à deux-sites

Dans ce chapitre, nous considérons une chaîne unidimensionnelle avec les conditions aux limites périodiques $N = 2$ pour le cas à deux sites. Notre système physique est constitué par deux atomes de type S situé chacun sur un site du réseau et présentant un électron célibataire dans le cas demi-plein. Ce modèle est relativement trivial mais instructif dans le sens qu'on peut calculer toutes les quantités physiques analytiquement. Ceci nous permet de mieux comprendre les différentes approximations. Tout d'abord pour résoudre ce problème, il est utile de passer par l'approximation HF afin de définir le spectre des quasi-particules HF et voir quels sont les états occupés relatifs à ce système. Ensuite, On peut séparer les canaux particule-trou (ph) de celui particule-particule (pp) (ou trou-trou (hh)) afin de définir l'opérateur d'excitation selon notre choix d'étude.

2.2.1 Approximation Hartree Fock

Tout d'abord, nous appliquons l'approximation HF dans le but de réécrire l'hamiltonien dans la base des quasi-particules et d'avoir un spectre d'excitation à particules indépendantes. Nous essayons de trouver la transformation (HF) qui diagonalise l'hamiltonien (2.1) dans cette approximation. Pour cela, on réécrit l'équation de mouvement à une particule sous la forme suivante

$$H_{k\sigma,l\sigma'}^{HF} = \left\langle \left\{ c_{k,\sigma}, \left[H, c_{l,\sigma'}^\dagger \right] \right\} \right\rangle. \quad (2.2)$$

Comme nous avons vérifié explicitement que les valeurs moyennes des densités $\langle c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,-\sigma} \rangle$ restent nulles même si on initialise le calcul HF self consistant avec une condition de remplissage où ces dernières sont différentes de zéro, nous pouvons nous contenter avec une transformation qui ne brise pas la symétrie du spin. Ainsi, la transformation HF générale est donné par

$$\begin{pmatrix} c_{1,\uparrow}^\dagger \\ c_{2,\uparrow}^\dagger \end{pmatrix} = D \begin{pmatrix} a_{1,\uparrow}^\dagger \\ a_{2,\uparrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} c_{2,\downarrow}^\dagger \\ c_{1,\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = D \begin{pmatrix} a_{1,\downarrow}^\dagger \\ a_{2,\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (2.3)$$

avec

$$D = \begin{pmatrix} \cos \vartheta & -\sin \vartheta e^{-i\varphi} \\ \sin \vartheta e^{i\varphi} & \cos \vartheta \end{pmatrix} \quad D^{-1} = D^T \quad (2.4)$$

qui conserve la symétrie de spin et l'état HF correspondant

$$|HF\rangle = a_{1,\uparrow}^\dagger a_{1,\downarrow}^\dagger |-\rangle. \quad (2.5)$$

A ce moment, on peut calculer les valeurs moyennes de $\langle c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} \rangle$ dans cet état, qui sont données par

$$\langle \hat{n}_{1,\uparrow} \rangle = \langle \hat{n}_{2,\downarrow} \rangle = \cos^2(\vartheta), \quad \langle \hat{n}_{1,\downarrow} \rangle = \langle \hat{n}_{2,\uparrow} \rangle = \sin^2(\vartheta), \quad (2.6)$$

et l'énergie HF, en fonction de ϑ et φ , est donnée par

$$E_{HF} = -2t \sin(2\vartheta) \cos(\varphi) + \frac{U}{2} \sin^2(2\vartheta). \quad (2.7)$$

Cette fonction est pèriodique de pèriode 2π en fonction de φ et de pèriode π en fonction de ϑ . Analytiquement, on calcule les dèrivées partielles de (2.7) par rapport à ϑ et φ ,

$$\frac{\partial E_{HF}}{\partial \varphi} \Big|_{\vartheta=Cst} = 0, \quad \frac{\partial E_{HF}}{\partial \vartheta} \Big|_{\varphi=Cst} = 0. \quad (2.8)$$

Ceci nous donne

$$\begin{aligned} \varphi &= 0, \\ \vartheta &= \pm \frac{\pi}{4} & \text{si } U \leq 2t \\ \vartheta &= \frac{1}{2} \text{Arcsin}\left(\frac{2t}{U}\right) & \text{si } U \geq 2t. \end{aligned} \quad (2.9)$$

On remarque bien sur la figure (Fig. 2.1) que le minimum de l'énergie HF est situé à la

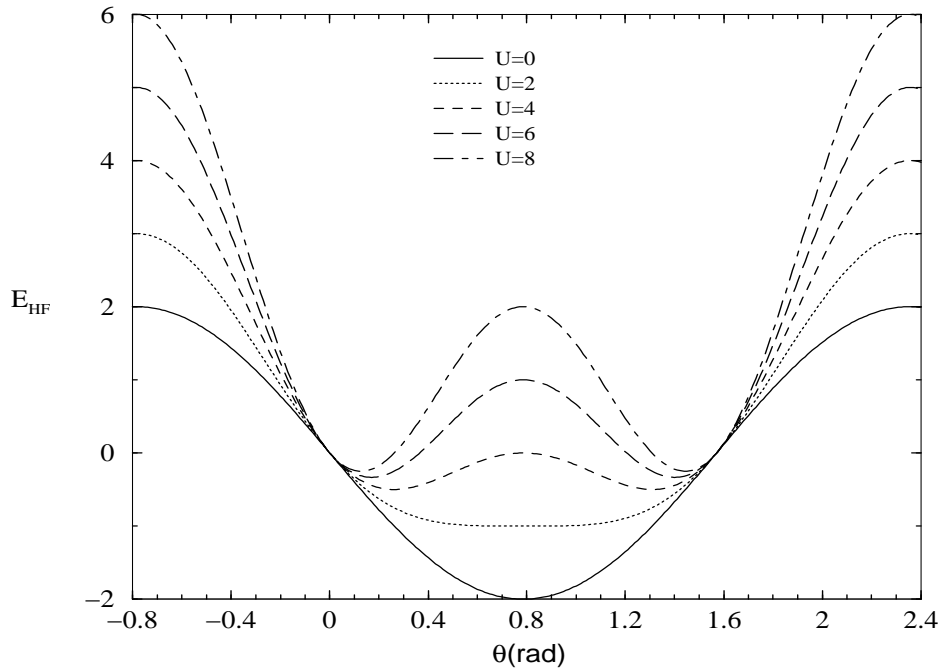


FIG. 2.1 – *Energie fondamentale HF en fonction de ϑ pour le cas à 2-sites.*

valeur de $\vartheta = \frac{\pi}{4}$ pour toute valeur de U comprise entre 0 et $2t$. Par contre pour $U \geq 2t$, ce minimum est situé à $\vartheta = \frac{1}{2} \text{Arcsin}\left(\frac{2t}{U}\right)$. Ainsi pour $U \leq 2t$, la transformation HF ne brise pas l'invariance de translation du fait qu'on a des densités de sites uniformes (Fig.

2.2) et elle correspond à des ondes planes. Ceci signifie que le système a un comportement métallique. Par contre, si $U \geq 2t$, cette symétrie est brisée et le système prend le comportement d'un isolant pour un minimum de $2\vartheta = \text{Arcsin}(\frac{2t}{U})$. La valeur $U_c = 2t$ est le point de transition métal-isolant, prédit par Mott [34]. Cette transition est due aux moments magnétiques locaux créés par l'interaction électron-électron. Le paramètre d'ordre est défini comme

$$m = | \langle \hat{n}_{i,\uparrow} \rangle - \langle \hat{n}_{i,\downarrow} \rangle | . \quad (2.10)$$

et donné en approximation HF par

$$\begin{aligned} m &= 0 & \text{si } U &\leq 2t , \\ m &= \sqrt{1 - \left(\frac{2t}{U}\right)^2} & \text{si } U &\geq 2t , \end{aligned} \quad (2.11)$$

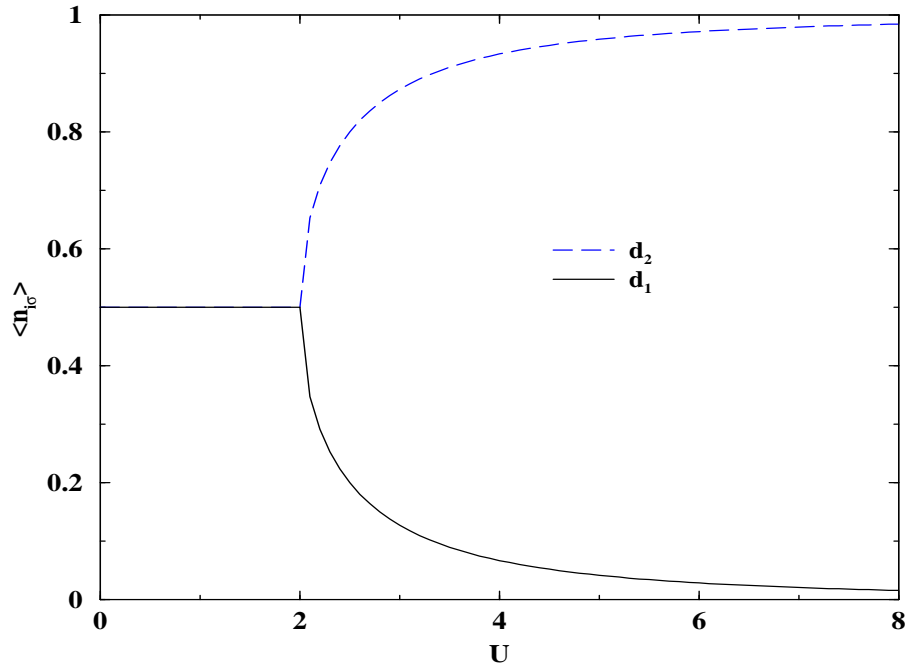


FIG. 2.2 – Densités HF en fonction de U pour le cas à 2-sites demi-pleins. on note par d_1 les valeurs moyennes de densités dans l'état HF de $\hat{n}_{1,\uparrow}$ et $\hat{n}_{2,\downarrow}$ et d_2 les valeurs moyennes de densités dans l'état HF de $\hat{n}_{2,\uparrow}$ et $\hat{n}_{1,\downarrow}$.

Pour $U \leq 2t$, les deux électrons sont complètement délocalisés, ce qui donne un paramètre d'ordre nul. Ainsi, le modèle de Hubbard décrit des électrons libres sur réseau

qui forment un gaz de Fermi libre, ou si on veut un métal idéal. L'état HF correspondant ($\vartheta = \frac{\pi}{4}$) est donné par

$$|HF\rangle = a_{1,\uparrow}^\dagger a_{1,\downarrow}^\dagger |-\rangle = \frac{1}{2} \left[c_{2,\downarrow}^\dagger c_{1,\uparrow}^\dagger + c_{1,\downarrow}^\dagger c_{2,\uparrow}^\dagger + c_{1,\uparrow}^\dagger c_{1,\downarrow}^\dagger + c_{2,\uparrow}^\dagger c_{2,\downarrow}^\dagger \right] |-\rangle . \quad (2.12)$$

Cet état montre bien que les sites sont occupés avec la même probabilité, c'est à dire que tous les termes ont le même poids statistique.

Par contre, pour $U \geq 2t$, les deux électrons deviennent de plus en plus localisés lorsque U augmente ($2\vartheta = \text{Arcsin}(\frac{2t}{U})$). Dans la limite atomique ($t \rightarrow 0$ ou $U \rightarrow \infty$), les électrons sont empêchés de sauter d'un site à un autre. Ils restent liés à un ion précis dans un état atomique, c'est un isolant antiferromagnétique dans le cas demi-plein. L'état HF correspondant est donné par

$$\lim_{U \rightarrow \infty} (|HF\rangle = a_{1,\uparrow}^\dagger a_{1,\downarrow}^\dagger |-\rangle) = c_{2,\downarrow}^\dagger c_{1,\uparrow}^\dagger |-\rangle \quad (2.13)$$

ce qui montre cette fois-ci que les deux électrons sont bien localisés (celui de spin- \uparrow dans le site 1 et celui de spin- \downarrow dans le site 2). On peut aussi retrouver l'autre état analogue en changeant le spin- \uparrow par \downarrow dans la transformation HF (2.3), c'est-à-dire l'état $c_{2,\uparrow}^\dagger c_{1,\downarrow}^\dagger |-\rangle$. Ceci explique l'existence d'une énergie d'excitation exacte qui tend vers zéro lorsque $U \rightarrow \infty$. Signalons aussi que cette brisure de symétrie qu'on voit se former également sur la figure (Fig.2.1) ne correspond pas à une brisure de symétrie continue, car la surface d'énergie en φ, ϑ ne forme pas un 'Chapeau Mexicain' comme on peut se convaincre facilement à partir de (2.7).

2.2.2 Hamiltonien de quasiparticules Hartree Fock

Dans ce paragraphe, on réécrit l'hamiltonien (2.1) dans la nouvelle base avec la transformation (2.3). Il est approprié de définir les opérateurs de quasi-particules HF b^\dagger et b comme

$$a_{1,\sigma}^\dagger \equiv b_{1,\sigma} , \quad a_{2,\sigma} \equiv b_{2,\sigma} \quad (2.14)$$

avec la propriété

$$b_{k,\sigma} |HF\rangle = 0 \quad \text{pour tout } k$$

L'état HF s'écrit alors

$$\begin{aligned} |HF\rangle &= a_{1,\uparrow}^\dagger a_{1,\downarrow}^\dagger |-\rangle \\ &\equiv b_{1,\uparrow}^\dagger b_{1,\downarrow}^\dagger |-\rangle . \end{aligned}$$

Ainsi, le hamiltonien en ordre normal des b^\dagger , b est donné par

$$\begin{aligned}
H = E_{HF} &+ \sum_{\sigma} [-\epsilon_1 \tilde{n}_{1,\sigma} + \epsilon_2 \tilde{n}_{2,\sigma} + \chi_1 (J_{\sigma}^- + J_{\sigma}^+)] \\
&+ \chi_2 [(\tilde{n}_{1,\uparrow} + \tilde{n}_{2,\uparrow})(\tilde{n}_{1,\downarrow} + \tilde{n}_{2,\downarrow}) - (J_{\uparrow}^- + J_{\uparrow}^+)(J_{\downarrow}^- + J_{\downarrow}^+)] \\
&+ \chi_3 [(\tilde{n}_{1,\uparrow} + \tilde{n}_{2,\uparrow})(J_{\downarrow}^- + J_{\downarrow}^+) + (J_{\uparrow}^- + J_{\uparrow}^+)(\tilde{n}_{1,\downarrow} + \tilde{n}_{2,\downarrow})] \\
&+ \chi_4 (\tilde{n}_{1,\uparrow} \tilde{n}_{2,\downarrow} + \tilde{n}_{2,\uparrow} \tilde{n}_{1,\downarrow})
\end{aligned} \tag{2.15}$$

avec les opérateurs,

$$\begin{aligned}
J_{\sigma}^- &= b_{1,\sigma} b_{2,\sigma} , & J_{\sigma}^+ &= b_{2,\sigma}^\dagger b_{1,\sigma}^\dagger , \\
\tilde{n}_{1,\sigma} &= b_{1,\sigma}^\dagger b_{1,\sigma} , & \tilde{n}_{2,\sigma} &= b_{2,\sigma}^\dagger b_{2,\sigma} ,
\end{aligned} \tag{2.16}$$

l'énergie fondamentale HF est donnée par

$$E_{HF} = -2tW + \frac{U}{2} W^2 , \tag{2.17}$$

les énergies HF à une particule (voir Fig.2.3)

$$\epsilon_1 = -tW + \frac{U}{2} W^2 , \quad \epsilon_2 = tW + U(1 - \frac{1}{2} W^2) , \tag{2.18}$$

et les coefficients,

$$\begin{aligned}
\chi_1 &= \sqrt{1 - W^2}(-t + \frac{U}{2} W) , & \chi_2 &= \frac{U}{2} W^2 , \\
\chi_3 &= -\frac{U}{2} W \sqrt{1 - W^2} , & \chi_4 &= -U , \\
W &= \sin(2\vartheta) .
\end{aligned} \tag{2.19}$$

On peut vérifier facilement que la minimisation de l'énergie HF revient à considérer le coefficient $\chi_1 = 0$. C'est aussi équivalent à dire que le commutateur $\langle HF | [H, J_{\sigma}^{\pm}] | HF \rangle = 0$. A ce moment, on définit les opérateurs suivants

$$\begin{aligned}
\hat{N}_{\sigma} &= c_{1,\sigma}^\dagger c_{1,\sigma} + c_{2,\sigma}^\dagger c_{2,\sigma} = 1 + \tilde{n}_{2,\sigma} - \tilde{n}_{1,\sigma} , \\
M_{\sigma} &= \tilde{n}_{1,\sigma} + \tilde{n}_{2,\sigma} , \\
-2J_{\sigma}^0 &= 1 - M_{\sigma} ,
\end{aligned} \tag{2.20}$$

formant avec les opérateurs J_{σ}^{\pm} une algèbre $SU(2)$. Ainsi, les règles de commutations sont données par

$$\begin{aligned}
[J_{\sigma}^-, J_{\sigma'}^+] &= -2J_{\sigma}^0 \delta_{\sigma\sigma'} , \\
[J_{\sigma}^0, J_{\sigma'}^{\pm}] &= \pm \delta_{\sigma\sigma'} J_{\sigma}^{\pm} , \\
[\hat{N}_{\sigma}, J_{\sigma'}^{\pm}] &= [\hat{N}_{\sigma}, J_{\sigma'}^0] = 0 .
\end{aligned} \tag{2.21}$$

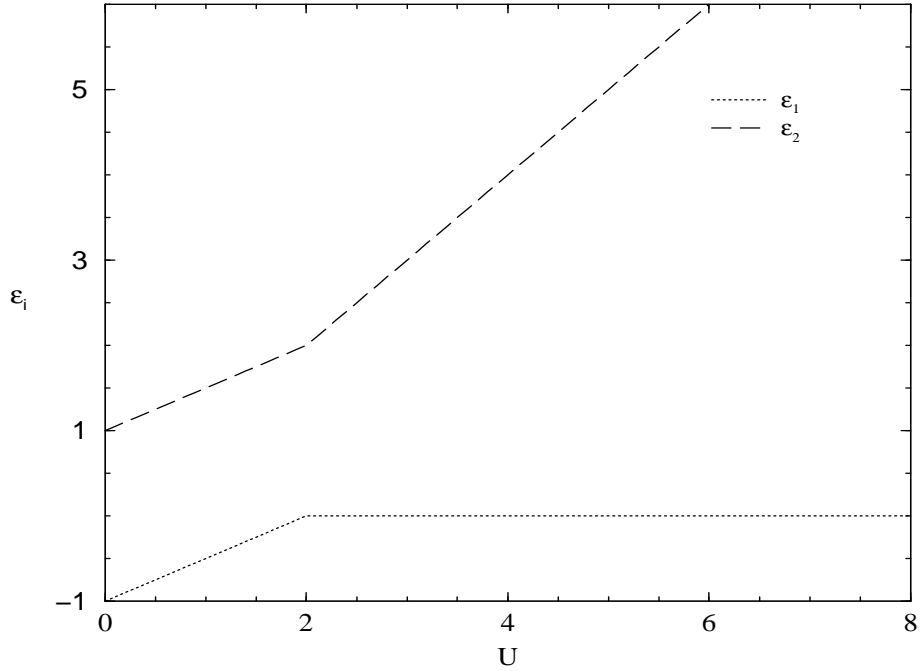


FIG. 2.3 – Energies d’excitations HF à une particule en fonction de U pour le cas à 2-sites demi-plein avec la projection de spin $m_s = 0$ (éq. (2.18)).

Dans la limite $t \rightarrow 0$ ou $U \rightarrow \infty$, le paramètre de la minimisation de l’énergie, $W \rightarrow 0$ ($\vartheta \rightarrow 0$). Dans ce cas, les opérateurs de quasi-particules ($a_{i,\sigma}$) sont ceux des vraies particules ($c_{i,\sigma}$). On peut vérifier que le hamiltonien (2.15) est égale au terme d’interaction de (2.1), du fait que la partie cinétique est négligeable.

Dans ce qui suit, nous travaillerons dans la base non brisée, c-à-d $\vartheta = \frac{\pi}{4}$, ce qui correspond à un état HF invariant par translation et la transformation (2.3) se confond avec celle des ondes planes

$$c_{j,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k a_{k,\sigma} e^{-ikj} . \quad (2.22)$$

Ainsi, on a deux vecteurs d’ondes, pour $U = 0$,

$$\begin{aligned} k_1 &= 0 && \text{pour les états} && |1, \sigma\rangle \\ k_2 &= -\pi && \text{pour les états} && |2, \sigma\rangle \end{aligned}$$

et les énergies de quasiparticules sont données par

$$\epsilon_k = -2t \cos(k) .$$

On représente ϵ_k en fonction de k dans la Fig.2.2.2 et on commence de remplir les états les plus bas. On remarque que c’est équivalent à un modèle à deux niveaux où chacun

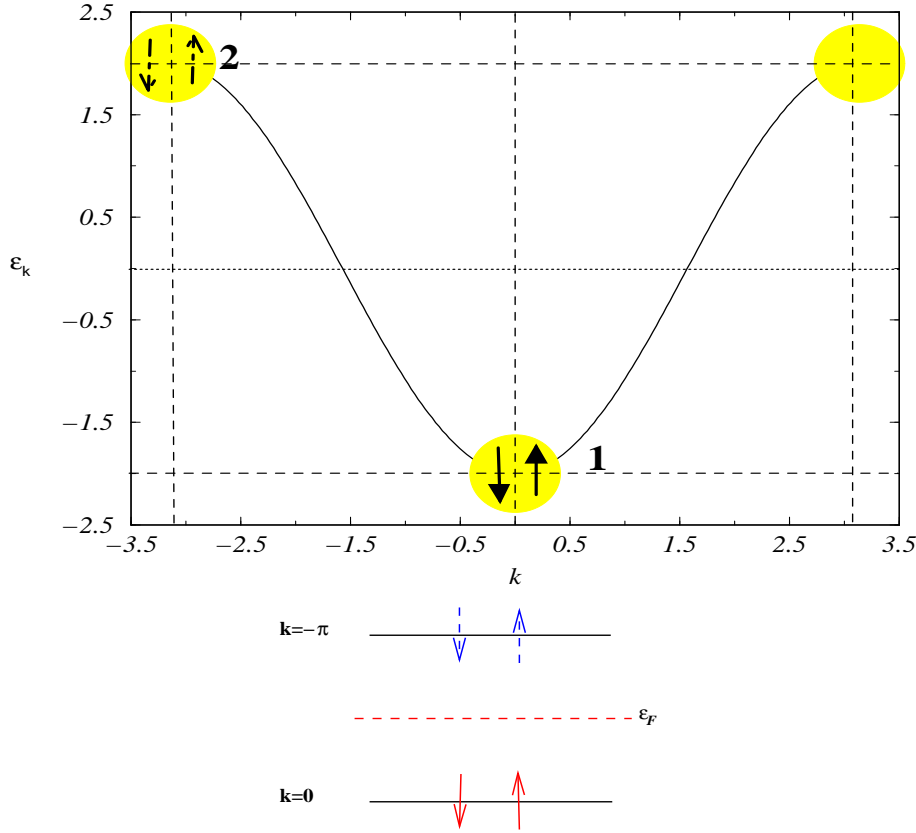


FIG. 2.4 – *Spectre d'excitation des quasiparticules HF à $U = 0$ pour le cas à 2-sites.*

peut être occupé par deux particules de spin opposés. Ceci nous donne l'expression de l'hamiltonien dans la base non brisée en fonction des $b_{k,\sigma}$ comme

$$\begin{aligned}
 H &= H_{HF} + H_{q=0} + H_{q=\pi} \\
 H_{HF} &= E_{HF} + \sum_{\sigma} [-\epsilon_1 \tilde{n}_{k_1,\sigma} + \epsilon_2 \tilde{n}_{k_2,\sigma}] \\
 H_{q=0} &= \frac{U}{2} (\tilde{n}_{k_2,\uparrow} - \tilde{n}_{k_1,\uparrow})(\tilde{n}_{k_2,\downarrow} - \tilde{n}_{k_1,\downarrow}) \\
 H_{q=\pi} &= -\frac{U}{2} (J_{\uparrow}^- + J_{\uparrow}^+)(J_{\downarrow}^- + J_{\downarrow}^+)
 \end{aligned} \tag{2.23}$$

avec les énergies HF à une particule dans cette base

$$\begin{aligned}
 E_{HF} &= -2t + \frac{U}{2} \\
 \epsilon_1 &= -t + \frac{U}{2}, \quad \epsilon_2 = t + \frac{U}{2},
 \end{aligned} \tag{2.24}$$

et les opérateurs d'excitations ph , J_σ^\pm , correspond à des excitations avec un moment de transfert $q = \pi$.

2.2.3 Réponse de charge et spin longitudinal

Dans la réponse de charge et spin longitudinal, nous considérons que des opérateurs d'excitation particule-trou qui conservent le spin, c'est à dire que l'état de particule a le même spin que celui du trou. En plus, dans ce qui suit, nous nous contenterons de développer les équations RPA dans la base non-brisée.

Développement des équations ph -RPA

On définit l'opérateur d'excitation RPA avec des composantes particule-trou de même spin et pour le transfert $q = -\pi$ comme

$$Q_\nu^\dagger = \mathcal{X}_\uparrow^\nu K_\uparrow^+ + \mathcal{X}_\downarrow^\nu K_\downarrow^+ - \mathcal{Y}_\uparrow^\nu K_\uparrow^- - \mathcal{Y}_\downarrow^\nu K_\downarrow^- \quad (2.25)$$

avec $K_\sigma^\pm = J_\sigma^\pm / \sqrt{\langle 1 - M_\sigma \rangle}$ et J_σ^\pm , M_σ sont définis en (2.16) et (2.20), respectivement. Les valeurs moyennes $\langle \dots \rangle$ sont toujours prises par rapport au vide RPA,

$$Q_\nu |RPA\rangle = 0 \quad (2.26)$$

et en tenant compte des relations d'orthogonalisation et de fermeture,

$$\begin{aligned} \sum_\sigma (\mathcal{X}_\sigma^\nu \mathcal{X}_\sigma^{\nu'} - \mathcal{Y}_\sigma^\nu \mathcal{Y}_\sigma^{\nu'}) &= \delta_{\nu\nu'} , & \sum_\sigma (\mathcal{X}_\sigma^\nu \mathcal{Y}_\sigma^{\nu'} - \mathcal{Y}_\sigma^\nu \mathcal{X}_\sigma^{\nu'}) &= 0 , \\ \sum_\nu (\mathcal{X}_\sigma^\nu \mathcal{X}_{\sigma'}^\nu - \mathcal{Y}_\sigma^\nu \mathcal{Y}_{\sigma'}^\nu) &= \delta_{\sigma\sigma'} , & \sum_\nu (\mathcal{X}_\sigma^\nu \mathcal{Y}_{\sigma'}^\nu - \mathcal{Y}_\sigma^\nu \mathcal{X}_{\sigma'}^\nu) &= 0 , \end{aligned} \quad (2.27)$$

cela nous permet d'inverser la relation (2.25)

$$\begin{aligned} J_\sigma^- &= \sqrt{1 - \langle M_\sigma \rangle} \sum_\nu (\mathcal{X}_\sigma^\nu Q_\nu + \mathcal{Y}_\sigma^\nu Q_\nu^\dagger) \\ J_\sigma^+ &= \sqrt{1 - \langle M_\sigma \rangle} \sum_\nu (\mathcal{Y}_\sigma^\nu Q_\nu + \mathcal{X}_\sigma^\nu Q_\nu^\dagger) \end{aligned} \quad (2.28)$$

Pour un système de fermions de spin- $\frac{1}{2}$, la relation de Casimir nous donne l'égalité

$$J_\sigma^+ J_\sigma^- + J_\sigma^- J_\sigma^+ = 1 \quad (2.29)$$

et par conséquent avec l'équation (2.21), on a

$$M_\sigma = 2 J_\sigma^+ J_\sigma^- . \quad (2.30)$$

Ainsi, on peut calculer les valeurs moyennes suivantes dans l'état RPA

$$\begin{aligned}
\langle J_{\sigma'}^+ J_{\sigma}^- \rangle &= \sqrt{\langle 1 - M_{\sigma'} \rangle \langle 1 - M_{\sigma} \rangle} \sum_{\nu} \mathcal{Y}_{\sigma'}^{\nu} \mathcal{Y}_{\sigma}^{\nu}, \\
\langle J_{\sigma'}^- J_{\sigma}^+ \rangle &= \sqrt{\langle 1 - M_{\sigma'} \rangle \langle 1 - M_{\sigma} \rangle} \sum_{\nu} \mathcal{X}_{\sigma'}^{\nu} \mathcal{X}_{\sigma}^{\nu}, \\
\langle J_{\sigma'}^+ J_{\sigma}^+ \rangle &= \sqrt{\langle 1 - M_{\sigma'} \rangle \langle 1 - M_{\sigma} \rangle} \sum_{\nu} \mathcal{Y}_{\sigma'}^{\nu} \mathcal{X}_{\sigma}^{\nu}, \\
\langle J_{\sigma'}^- J_{\sigma}^- \rangle &= \sqrt{\langle 1 - M_{\sigma'} \rangle \langle 1 - M_{\sigma} \rangle} \sum_{\nu} \mathcal{X}_{\sigma'}^{\nu} \mathcal{Y}_{\sigma}^{\nu}, \\
\langle M_{\sigma} \rangle &= \frac{2 \sum_{\nu} |\mathcal{Y}_{\sigma}^{\nu}|^2}{1 + 2 \sum_{\nu} |\mathcal{Y}_{\sigma}^{\nu}|^2},
\end{aligned} \tag{2.31}$$

Enfin, pour fermer le système d'équations SCRPA, on doit calculer les fonctions de corrélations de type $\langle M_{\sigma} M_{\sigma'} \rangle$ en fonction des amplitudes RPA,

$$M_{\sigma} M_{\sigma'} = 2 M_{\sigma}. \tag{2.32}$$

Avec (2.30), il est simple de montrer que pour $\sigma \neq \sigma'$

$$M_{\sigma} M_{\sigma'} = 4 J_{\sigma}^{\dagger} J_{\sigma'}^{\dagger} J_{\sigma'} J_{\sigma} \tag{2.33}$$

ce qui nous donne la valeur moyenne dans l'état RPA

$$\langle M_{\sigma} M_{\sigma'} \rangle = 4(1 - \langle M_{\sigma} \rangle)(1 - \langle M_{\sigma'} \rangle) \sum_{\nu\nu'} \sum_{\nu_1\nu_2} \mathcal{Y}_{\sigma}^{\nu} \mathcal{Y}_{\sigma'}^{\nu'} \mathcal{Y}_{\sigma'}^{\nu_1} \mathcal{Y}_{\sigma}^{\nu_2} \langle Q_{\nu} Q_{\nu_1} Q_{\nu_2}^{\dagger} Q_{\nu'}^{\dagger} \rangle. \tag{2.34}$$

Pour le calcul des fonctions de corrélations qui apparaissent à droite dans l'équation (2.34), on commute les Q_{ν} vers la droite, ce qui engendre des fonctions de corrélations $\langle M_{\sigma} M_{\sigma'} \rangle$ et on obtient un système fermé pour ces derniers. Le détail de calcul est donné dans l'annexe (A.1).

Maintenant, les éléments de matrice RPA peuvent s'exprimer de la manière suivante

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_{\uparrow,\uparrow} &= \langle [K_{\uparrow}^-, [H, K_{\uparrow}^+]] \rangle = 2t + U \frac{\langle (J_{\uparrow}^- J_{\downarrow}^+ + J_{\uparrow}^- J_{\downarrow}^-) \rangle}{(\langle 1 - M_{\uparrow} \rangle)} \\
&= 2t + U \sqrt{\frac{\langle 1 - M_{\downarrow} \rangle}{\langle 1 - M_{\uparrow} \rangle}} \sum_{\nu} (\mathcal{X}_{\uparrow}^{\nu} \mathcal{X}_{\downarrow}^{\nu} + \mathcal{X}_{\uparrow}^{\nu} \mathcal{Y}_{\downarrow}^{\nu}) \\
\mathcal{A}_{\downarrow,\downarrow} &= \langle [K_{\downarrow}^-, [H, K_{\downarrow}^+]] \rangle = 2t + U \frac{\langle (J_{\uparrow}^+ J_{\downarrow}^- + J_{\uparrow}^- J_{\downarrow}^-) \rangle}{(\langle 1 - M_{\uparrow} \rangle)} \\
&= 2t + U \sqrt{\frac{\langle 1 - M_{\uparrow} \rangle}{\langle 1 - M_{\downarrow} \rangle}} \sum_{\nu} (\mathcal{Y}_{\uparrow}^{\nu} \mathcal{Y}_{\downarrow}^{\nu} + \mathcal{X}_{\uparrow}^{\nu} \mathcal{Y}_{\downarrow}^{\nu})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_{\uparrow,\downarrow} &= \langle [K_{\uparrow}^-, [H, K_{\downarrow}^+]] \rangle = -\frac{U}{2} \frac{\langle (1 - M_{\uparrow})(1 - M_{\downarrow}) \rangle}{\sqrt{\langle 1 - M_{\uparrow} \rangle \langle 1 - M_{\downarrow} \rangle}} \\
\mathcal{A}_{\downarrow,\uparrow} &= \langle [K_{\downarrow}^-, [H, K_{\uparrow}^+]] \rangle = -\frac{U}{2} \frac{\langle (1 - M_{\uparrow})(1 - M_{\downarrow}) \rangle}{\sqrt{\langle 1 - M_{\uparrow} \rangle \langle 1 - M_{\downarrow} \rangle}} \\
\mathcal{B}_{\uparrow,\uparrow} &= -\langle [K_{\uparrow}^-, [H, K_{\uparrow}^-]] \rangle = U \frac{\langle (J_{\uparrow}^- J_{\downarrow}^+ + J_{\uparrow}^- J_{\downarrow}^-) \rangle}{\langle (1 - M_{\uparrow}) \rangle} \\
&= U \sqrt{\frac{\langle 1 - M_{\downarrow} \rangle}{\langle 1 - M_{\uparrow} \rangle}} \sum_{\nu} (\mathcal{X}_{\uparrow}^{\nu} \mathcal{Y}_{\downarrow}^{\nu} + \mathcal{X}_{\uparrow}^{\nu} \mathcal{X}_{\downarrow}^{\nu}) \\
\mathcal{B}_{\downarrow,\downarrow} &= -\langle [K_{\downarrow}^-, [H, K_{\downarrow}^-]] \rangle = 2t + U \frac{\langle (J_{\uparrow}^+ J_{\downarrow}^- + J_{\uparrow}^- J_{\downarrow}^-) \rangle}{\langle (1 - M_{\uparrow}) \rangle} \\
&= U \sqrt{\frac{\langle 1 - M_{\uparrow} \rangle}{\langle 1 - M_{\downarrow} \rangle}} \sum_{\nu} (\mathcal{X}_{\uparrow}^{\nu} \mathcal{Y}_{\downarrow}^{\nu} + \mathcal{Y}_{\uparrow}^{\nu} \mathcal{Y}_{\downarrow}^{\nu}) \\
\mathcal{B}_{\uparrow,\downarrow} &= -\langle [K_{\uparrow}^-, [H, K_{\downarrow}^-]] \rangle = -\frac{U}{2} \frac{\langle (1 - M_{\uparrow})(1 - M_{\downarrow}) \rangle}{\sqrt{\langle 1 - M_{\uparrow} \rangle \langle 1 - M_{\downarrow} \rangle}} \\
\mathcal{B}_{\downarrow,\uparrow} &= -\langle [K_{\downarrow}^-, [H, K_{\uparrow}^-]] \rangle = -\frac{U}{2} \frac{\langle (1 - M_{\uparrow})(1 - M_{\downarrow}) \rangle}{\sqrt{\langle 1 - M_{\uparrow} \rangle \langle 1 - M_{\downarrow} \rangle}}
\end{aligned} \tag{2.35}$$

En plus, la conservation du nombre de particules de spin σ (2.20), N_{σ} , nous donne

$$\langle \tilde{n}_{1\sigma} \rangle = \langle \tilde{n}_{2\sigma} \rangle, \tag{2.36}$$

et également la conservation de N_{σ}^2 ,

$$\langle (\tilde{n}_{2\uparrow} - \tilde{n}_{1\uparrow})(\tilde{n}_{2\downarrow} - \tilde{n}_{1\downarrow}) \rangle = 0. \tag{2.37}$$

En tenant compte des relations d'orthogonalisation et de fermeture, on obtient

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_{\uparrow,\uparrow} &= \mathcal{A}_{\downarrow,\downarrow} = A, & \mathcal{A}_{\uparrow,\downarrow} &= \mathcal{A}_{\downarrow,\uparrow} = A', \\
\mathcal{B}_{\uparrow,\uparrow} &= \mathcal{B}_{\downarrow,\downarrow} = B, & \mathcal{B}_{\uparrow,\downarrow} &= \mathcal{B}_{\downarrow,\uparrow} = B'.
\end{aligned} \tag{2.38}$$

La matrice ph -RPA prend donc la forme

$$\begin{pmatrix} A & A' & B & B' \\ A' & A & B' & B \\ -B & -B' & -A & -A' \\ -B' & -B & -A' & -A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{X}_{\uparrow}^{\nu} \\ \mathcal{X}_{\downarrow}^{\nu} \\ \mathcal{Y}_{\uparrow}^{\nu} \\ \mathcal{Y}_{\downarrow}^{\nu} \end{pmatrix} = \mathcal{E}_{\nu} \begin{pmatrix} \mathcal{X}_{\uparrow}^{\nu} \\ \mathcal{X}_{\downarrow}^{\nu} \\ \mathcal{Y}_{\uparrow}^{\nu} \\ \mathcal{Y}_{\downarrow}^{\nu} \end{pmatrix}. \tag{2.39}$$

Les valeurs propres de cette matrice sont

$$\mathcal{E}_1 = \pm \sqrt{(A - A')^2 - (B - B')^2}, \quad \mathcal{E}_2 = \pm \sqrt{(A + A')^2 - (B + B')^2}. \tag{2.40}$$

On prend pour solutions physiques les valeurs positives et les vecteurs correspondants qui ne sont pas normalisés,

$$\begin{aligned} V_1 &= \left[\frac{A - A' + \mathcal{E}_1}{B - B'}, -\frac{A - A' + \mathcal{E}_1}{B - B'}, -1, 1 \right], \\ V_2 &= \left[-\frac{A + A' + \mathcal{E}_2}{B + B'}, -\frac{A + A' + \mathcal{E}_2}{B + B'}, 1, 1 \right]. \end{aligned} \quad (2.41)$$

A ce moment, on peut calculer les amplitudes RPA qui obeissent à la normalisation (2.27),

$$\begin{aligned} \|V_1\| &= \sqrt{2 \left(\frac{A - A' + \mathcal{E}_1}{B - B'} \right)^2 - 2}, & \|V_2\| &= \sqrt{2 \left(\frac{A + A' + \mathcal{E}_2}{B + B'} \right)^2 - 2}, \\ \mathcal{X}_\uparrow^1 &= -\mathcal{X}_\downarrow^1 = \frac{A - A' + \mathcal{E}_1}{(B - B') \|V_1\|}, & \mathcal{Y}_\uparrow^1 &= -\mathcal{Y}_\downarrow^1 = -\frac{1}{\|V_1\|}, \\ \mathcal{X}_\uparrow^2 &= \mathcal{X}_\downarrow^2 = -\frac{A + A' + \mathcal{E}_2}{(B + B') \|V_2\|}, & \mathcal{Y}_\uparrow^2 &= \mathcal{Y}_\downarrow^2 = \frac{1}{\|V_2\|}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Finalement, on aboutit à un système d'équation fermé non-linéaire qu'on peut résoudre numériquement. Aussi pour l'énergie du fondamental SCRPA, $E_{SCRPA} = \langle 0|H|0 \rangle$, on obtient l'expression

$$\begin{aligned} E_{SCRPA} &= E_{HF} - t \sum_{\sigma} \langle M_{\sigma} \rangle \\ &- \frac{U}{2} \sqrt{(1 - \langle M_{\uparrow} \rangle)(1 - \langle M_{\downarrow} \rangle)} \sum_{\nu} (\mathcal{X}_{\uparrow}^{\nu} \mathcal{Y}_{\downarrow}^{\nu} + \mathcal{X}_{\uparrow}^{\nu} \mathcal{X}_{\downarrow}^{\nu} + \mathcal{Y}_{\uparrow}^{\nu} \mathcal{Y}_{\downarrow}^{\nu} + \mathcal{Y}_{\uparrow}^{\nu} \mathcal{X}_{\downarrow}^{\nu}) \end{aligned} \quad (2.43)$$

avec les $\langle M_{\sigma} \rangle$ données en (2.31).

RPA standard particule-trou

Tout d'abord, on commence par considérer la RPA standard, c'est à dire on remplace dans les expressions (2.35) l'état fondamental RPA par celui de HF (ceci est équivalent à l'approximation quasi-boson). C'est également équivalent à considérer en (2.35) les deux vecteurs pour $\nu = 1, 2$ comme (ceci correspond à la solution RPA pour $U = 0$)

$$\begin{pmatrix} \mathcal{X}_{\uparrow}^1 \\ \mathcal{X}_{\downarrow}^1 \\ \mathcal{Y}_{\uparrow}^1 \\ \mathcal{Y}_{\downarrow}^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \mathcal{X}_{\uparrow}^2 \\ \mathcal{X}_{\downarrow}^2 \\ \mathcal{Y}_{\uparrow}^2 \\ \mathcal{Y}_{\downarrow}^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.44)$$

ce qui implique que $\langle M_{\sigma} \rangle = 0$. Ainsi, les éléments de matrice RPA (2.35) sont donnés par

$$A = 2t, \quad B = 0, \quad A' = B' = -\frac{U}{2}. \quad (2.45)$$

On voit bien que la RPA standard correspond à une linéarisation de notre problème; l'énergie fondamentale dans l'état RPA est donnée par l'expression bien connue [2]

$$E_{RPA} = E_{HF} - \sum_{\nu} \mathcal{E}_{\nu} \sum_{\sigma} |\mathcal{Y}_{\sigma}^{\nu}|^2 \quad (2.46)$$

Les énergies d'excitations RPA, dans la région sphérique, peuvent être déterminées analytiquement comme

$$\mathcal{E}_1 = 2t \sqrt{1 - \frac{U}{2t}}, \quad \mathcal{E}_2 = 2t \sqrt{1 + \frac{U}{2t}}. \quad (2.47)$$

Nous présentons les résultats pour les énergies d'excitations sur la Fig. 2.5 et pour l'énergie du fondamental sur la Fig. 2.6.

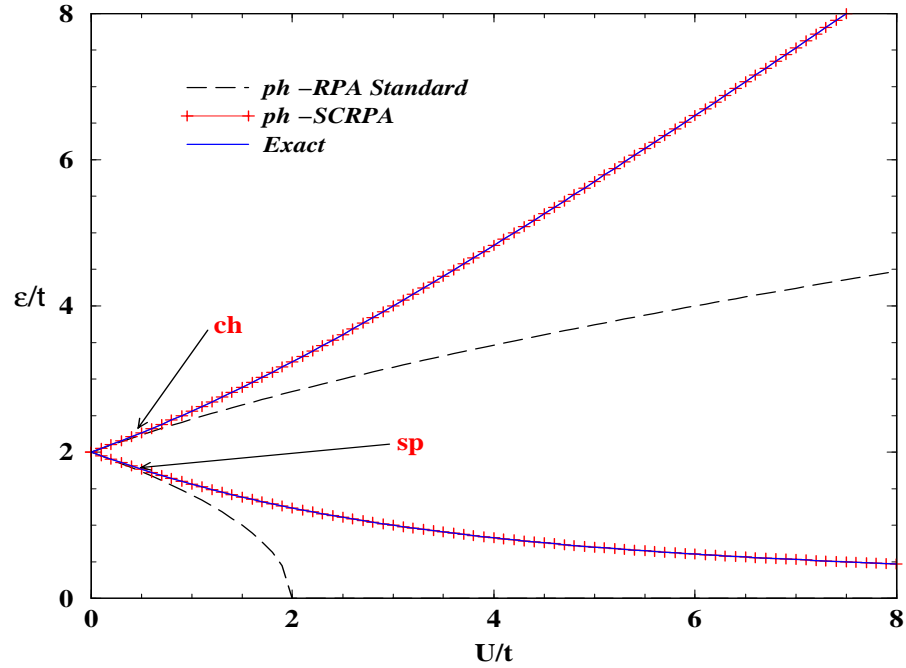


FIG. 2.5 – Énergies d'excitation *ph*-RPA standard, *ph*-SCRPA (réponse de charge) et celles exactes dans la région sphérique ($W = 1$) pour le cas à 2-sites.

Pour des petites valeurs de U , la RPA standard donne un bon accord avec la solution exacte pour les deux états excités ainsi que pour l'énergie du fondamental. Par contre, au voisinage de $U = 2$, elle s'éloigne de la solution exacte et l'énergie du premier état excité tombe à zéro ce qui indique la transition de phase à un état qui brise la symétrie de

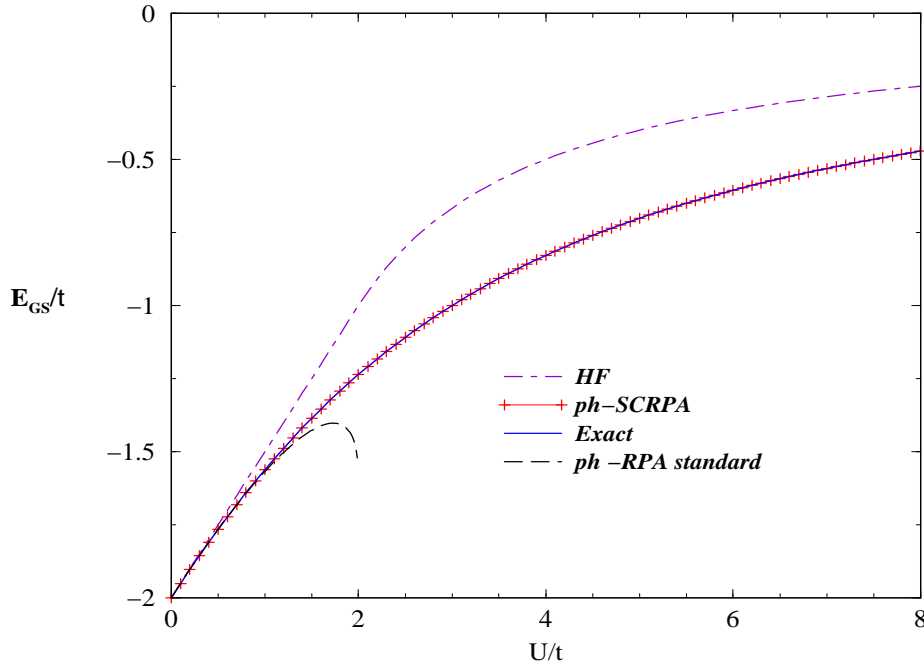


FIG. 2.6 – *Energies du fondamental HF, ph -RPA standard, ph -SCRPA (réponse de charge) et exacte dans la région sphérique pour le cas à 2-sites.*

translation où les moments magnétiques locaux sont différents de zéro. Nous avons vu ceci également en discutant la solution HF. Cette transition de phase artificielle, qui n'existe pas dans la solution exacte, est due au fait que la RPA standard surestime les corrélations au voisinage du point de transition.

SCRPA particule-trou

On remarque bien que le problème se réduit à quatre amplitudes RPA, en raison de symétrie,

$$\begin{aligned} \mathcal{X}_{\uparrow}^1 &= -\mathcal{X}_{\downarrow}^1 \equiv x_1, & \mathcal{Y}_{\uparrow}^1 &= -\mathcal{Y}_{\downarrow}^1 \equiv y_1, \\ \mathcal{X}_{\uparrow}^2 &= \mathcal{X}_{\downarrow}^2 \equiv x_2, & \mathcal{Y}_{\uparrow}^2 &= \mathcal{Y}_{\downarrow}^2 \equiv y_2. \end{aligned} \quad (2.48)$$

ce qui nous permet de réécrire les densités sous la forme

$$M_{\uparrow} = M_{\downarrow} = \frac{2(y_2^2 + y_1^2)}{1 + 2(y_2^2 + y_1^2)} \quad (2.49)$$

ainsi que les éléments de matrice SCRPA

$$A = 2t + U(x_2^2 - x_1^2 + x_2 y_2 - x_1 y_1)$$

$$\begin{aligned}
A' &= B' = -\frac{U}{2} \left[1 + 2 (y_2^2 + y_1^2) \right] \\
B &= U (x_2^2 - x_1^2 + x_2 y_2 - x_1 y_1)
\end{aligned} \tag{2.50}$$

Egalement l'énergie fondamentale SCRPA s'exprime comme

$$E_{SCRPA} = \frac{-2t + U (x_1^2 + y_1^2 + x_1 y_1 - x_2 y_2)}{1 + 2 (y_2^2 + y_1^2)} \tag{2.51}$$

On initialise le calcul itératif par la solution RPA standard. On remarque qu'il y a une convergence rapide de la solution SCRPA vers la solution exacte. Les résultats de la SCRPA sont représentés dans les figures (Fig. 2.5 et Fig. 2.6). Le formalisme RPA self consistante a donc reproduit la solution exacte pour l'énergie fondamentale et celles des excitations (voir Tab. 2.1 et Tab. 2.2) pour toute valeur de U . Ceci ne doit pas être considéré comme un résultat trivial. Bien au contraire, habituellement les approches approximatives du problème à N-corps se dégradent lorsque le nombre de particules diminue. Il est remarquable que ce résultat exact pour tout U a été trouvé dans la base des ondes planes, c-à-d respectant la symétrie de translation, tandis que HF et RPA standard indiquent qu'il y a une brisure spontanée de cette symétrie à partir de $U_c = 2$. On comparera ces résultats avec ceux trouvés récemment utilisant d'autres approches dans le paragraphe (2.4).

Ce résultat qu'on vient de trouver numériquement, on peut aussi le vérifier en déterminant analytiquement les solutions SCRPA. On détermine l'état fondamental exact (B.9) par la condition,

$$Q_\nu |0\rangle = 0, \tag{2.52}$$

$$|0\rangle = \left(\cos(\phi) + \sin(\phi) J_\uparrow^+ J_\downarrow^+ \right) |HF\rangle \tag{2.53}$$

ainsi, on peut exprimer toutes les valeurs moyennes qui apparaissent dans l'équation de mouvement en fonction du paramètre ϕ . En effet, on a

$$\begin{aligned}
\langle 0 | \tilde{n}_{k,\sigma} | 0 \rangle &= \langle 0 | \tilde{n}_{k,\sigma} \tilde{n}_{k,-\sigma} | 0 \rangle = \sin^2(\phi), & \langle 0 | 1 - M_\sigma | 0 \rangle &= 1 - 2 \sin^2(\phi), \\
\langle 0 | J_\sigma^+ J_\sigma^- | 0 \rangle &= \sin^2(\phi), & \langle 0 | J_\sigma^+ J_{-\sigma}^- | 0 \rangle &= 0, \\
\langle 0 | J_\sigma^+ J_{-\sigma}^+ | 0 \rangle &= \langle 0 | J_\sigma^- J_{-\sigma}^- | 0 \rangle = \frac{1}{2} \sin(2\phi).
\end{aligned} \tag{2.54}$$

Ainsi, les éléments de matrice RPA sont donnés par

$$\begin{aligned}
A &= 2t + U \frac{\tan(\phi)}{1 - \tan^2(\phi)}, & B &= U \frac{\tan(\phi)}{1 - \tan^2(\phi)}, \\
A' &= B' = -\frac{U}{2} \frac{1 + \tan^2(\phi)}{1 - \tan^2(\phi)},
\end{aligned} \tag{2.55}$$

les énergies d'excitations,

$$\mathcal{E}_1 = 2t \sqrt{1 - \frac{U}{2t} \frac{1 - \tan(\phi)}{1 + \tan(\phi)}}, \quad \mathcal{E}_2 = 2t \sqrt{1 + \frac{U}{2t} \frac{1 + \tan(\phi)}{1 - \tan(\phi)}}. \tag{2.56}$$

et les amplitudes RPA,

$$\begin{aligned} x_1 &= \sqrt{\frac{1+\alpha}{2}}, & y_1 &= -\frac{\alpha}{\sqrt{2(1+\alpha)}}, \\ x_2 &= \sqrt{\frac{1-\beta}{2}}, & y_2 &= \frac{\beta}{\sqrt{2(1-\beta)}}. \end{aligned} \quad (2.57)$$

avec

$$\alpha = \frac{\frac{U\kappa}{4t}}{1 + \sqrt{1 - \frac{U}{2t\kappa}}}, \quad \beta = \frac{\frac{U}{4t\kappa}}{1 + \sqrt{1 - \frac{U\kappa}{2t}}}, \quad \kappa = \frac{1 + tg(\phi)}{1 - tg(\phi)}. \quad (2.58)$$

Ainsi, les équations SCRPA ont été transformées en une équation non-linéaire pour ϕ qu'on peut résoudre numériquement. Ce résultat est toujours la solution exacte. Ainsi, l'énergie fondamentale SCRPA (2.43) est donnée par

$$E_{SCRPA} = -2t \cos(2\phi) + \frac{U}{2} (1 - \sin(2\phi)) \quad (2.59)$$

avec le paramètre ϕ ,

$$\phi = \arctan \left(\frac{U}{4t + \sqrt{16t^2 + U^2}} \right). \quad (2.60)$$

ce qui est aussi le résultat exact.

Nombre d'occupation

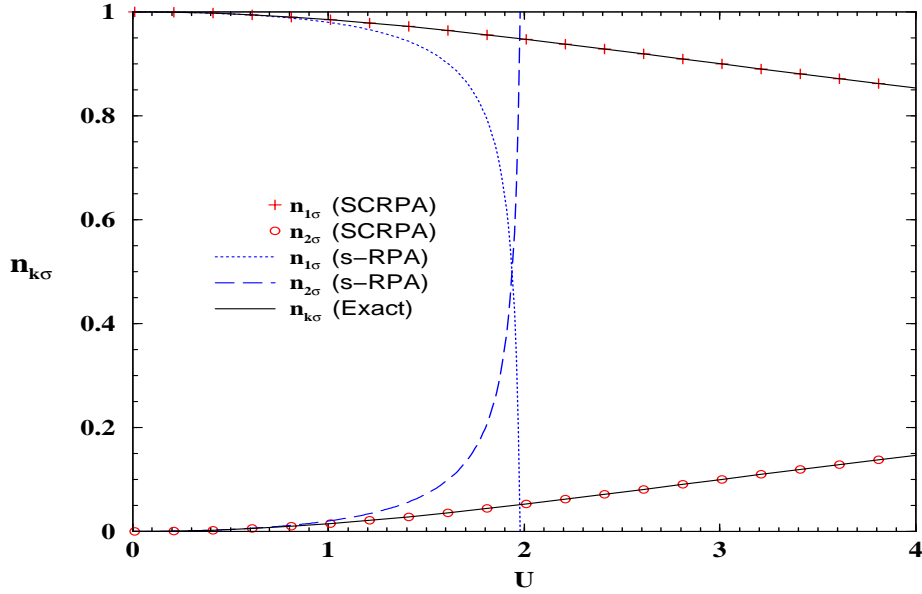
Dans ce paragraphe, nous calculons les nombres d'occupations par la s-RPA et la SCRPA avec (2.54). On remarque sur la figure (Fig.2.7) que la solution s-RPA diverge au point de transition de phase champ moyen ($U_c = 2t$). Ceci est dû au fait que les amplitudes RPA deviennent infinies. En revanche, la SCRPA reproduit la solution exacte pour toute valeur de U . Ce qui prouve encore une fois la performance de la SCRPA.

2.2.4 Reformulation du problème

Comme on voit bien en (2.48) l'égalité des amplitudes SCRPA, on peut redéfinir l'opérateur d'excitation pour les voies de charge et de spin longitudinal séparément.

La voie $S = 1$ ou réponse de spin longitudinal

$$Q_{1,\nu}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[x_1^\nu (K_\uparrow^+ - K_\downarrow^+) - y_1^\nu (K_\uparrow^- - K_\downarrow^-) \right] \quad (2.61)$$

FIG. 2.7 – Nombre d'occupation en fonction de U .

Ainsi, on se retrouve avec une matrice SCRPA de dimension 2×2 , avec

$$\mathcal{A}_1 = A - A' = 2t + \frac{U}{2} \frac{1 + \tan(\phi)}{1 - \tan(\phi)} \quad \mathcal{B}_1 = B - B' = \frac{U}{2} \frac{1 + \tan(\phi)}{1 - \tan(\phi)} \quad (2.62)$$

et la valeur propre correspondante est donnée par

$$\mathcal{E}_1 = \sqrt{\mathcal{A}_1^2 - \mathcal{B}_1^2} \quad (2.63)$$

$$x_1 = \frac{\mathcal{E}_1 - \mathcal{A}_1}{\sqrt{2\mathcal{E}_1(\mathcal{E}_1 - \mathcal{A}_1)}}, \quad y_1 = \frac{\mathcal{B}_1}{\sqrt{2\mathcal{E}_1(\mathcal{E}_1 - \mathcal{A}_1)}}, \quad (2.64)$$

on vérifie bien que $\frac{y_1}{x_1} = \tan(\phi)$.

La voie $S = 0$ ou réponse de charge

$$Q_{2,\nu}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[x_2^\nu (K_\uparrow^+ + K_\downarrow^+) - y_2^\nu (K_\uparrow^- + K_\downarrow^-) \right] \quad (2.65)$$

Ainsi, on se retrouve aussi avec une matrice SCRPA de dimension 2×2 , avec

$$\mathcal{A}_2 = A + A' = 2t + \frac{U}{2} \frac{1 - \tan(\phi)}{1 + \tan(\phi)} \quad \mathcal{B}_2 = B + B' = \frac{U}{2} \frac{1 - \tan(\phi)}{1 + \tan(\phi)} \quad (2.66)$$

et la valeur propre correspondante est donnée par

$$\mathcal{E}_2 = \sqrt{\mathcal{A}_2^2 - \mathcal{B}_2^2} \quad (2.67)$$

U	E_{GS}^{HF}	E_{GS}^{ph-RPA}	E_{GS}^{exact}	$E_{GS}^{ph-SCRPA}$
0.0	-2.00000000	-2.00000000	-2.00000000	-2.00000000
0.5	-1.75000000	-1.76594061	-1.76556444	-1.76556444
1.0	-1.50000000	-1.56814835	-1.56155281	-1.56155281
1.5	-1.25000000	-1.42712434	-1.38600094	-1.38600094
2.0	-1.00000000		-1.23606798	-1.23606798
2.5	-0.80000000		-1.10849528	-1.10849528
3.0	-0.66666667		-1.00000000	-1.00000000
3.5	-0.57142857		-0.90753645	-0.90753645
4.0	-0.50000000		-0.82842712	-0.82842712
4.5	-0.44444444		-0.76039864	-0.76039864
5.0	-0.40000000		-0.70156212	-0.70156212
5.5	-0.36363636		-0.65036763	-0.65036763
6.0	-0.33333333		-0.60555128	-0.60555128

TAB. 2.1 – Comparaison des résultats de l'approximation HF, ph -RPA standard, ph -SCRPA et exacts pour l'énergie fondamentale dans le cas à deux sites.

$$x_2 = \frac{\mathcal{E}_2 - \mathcal{A}_2}{\sqrt{2\mathcal{E}_2(\mathcal{E}_2 - \mathcal{A}_2)}} , \quad y_2 = \frac{\mathcal{B}_2}{\sqrt{2\mathcal{E}_2(\mathcal{E}_2 - \mathcal{A}_2)}} , \quad (2.68)$$

on vérifie aussi que $\frac{y_2}{x_2} = \tan(\phi)$ avec $U = \frac{8 \tan(\phi)}{1 - \tan^2(\phi)}$. Ainsi, l'état fondamental est donné par

$$|0\rangle = c_0 \left[1 + \frac{y_i}{x_i} J_{\uparrow}^+ J_{\downarrow}^+ \right] |HF\rangle \quad i=1,2 \quad (2.69)$$

et avec la normalisation, $c_0 = \cos(\phi)$.

U	\mathcal{E}_1^{ph-RPA}	$\mathcal{E}_1^{ph-SCRPA}$	\mathcal{E}_1^{Exact}		\mathcal{E}_2^{ph-RPA}	$\mathcal{E}_2^{ph-SCRPA}$	\mathcal{E}_2^{Exact}
0.0	2.00000000	2.00000000	2.00000000		2.00000000	2.00000000	2.00000000
0.5	1.73205078	1.76556444	1.76556444		2.23606801	2.26556444	2.26556444
1.0	1.41421354	1.56155281	1.56155281		2.44948983	2.56155281	2.56155281
1.5	1.00000000	1.38600094	1.38600094		2.64575124	2.88600094	2.88600094
2.0		1.23606798	1.23606798		2.82842708	3.23606798	3.23606798
2.5		1.10849524	1.10849528		3.00000000	3.60849524	3.60849528
3.0		1.00000003	1.00000000		3.16227770	4.00000003	4.00000000
3.5		0.90753640	0.90753645		3.31662488	4.40753640	4.40753645
4.0		0.82842715	0.82842712		3.46410155	4.82842715	4.82842712
4.5		0.76039869	0.76039864		3.60555124	5.26039869	5.26039864
5.0		0.70156216	0.70156212		3.74165750	5.70156216	5.70156212
5.5		0.65036764	0.65036763		3.87298346	6.15036764	6.15036763
6.0		0.60555152	0.60555128		4.00000000	6.60555152	6.60555128

TAB. 2.2 – Comparaison des résultats de la ph -RPA standard, ph -SCRPA et exacts pour le premier et deuxième état excité dans le cas à deux sites.

2.2.5 Réponse du spin transverse

Pour la réponse de spin (plus précisément des excitations de spin transverse), nous considérons des opérateurs d'excitations particule-trou qui changent le spin, c'est à dire l'état de particule et celui du trou ont des spins opposés. Ainsi, on définit les opérateurs d'excitations particule-trou de spin comme suit

$$\begin{aligned}
J_1^- &= b_{1,\downarrow} b_{2,\uparrow} , & J_2^- &= b_{1,\uparrow} b_{1,\downarrow} , \\
M_1 &= \tilde{n}_{1,\downarrow} + \tilde{n}_{2,\uparrow} , & M_2 &= \tilde{n}_{1,\uparrow} + \tilde{n}_{2,\downarrow} ,
\end{aligned} \tag{2.70}$$

avec les relations de commutations,

$$\begin{aligned}
[J_i^-, J_{i'}^+] &= \delta_{ii'} (1 - M_i) , \\
[J_i^-, J_{i'}^-] &= [J_i^+, J_{i'}^+] = 0 , & [M_i, J_i^\pm] &= \pm J_i^\pm .
\end{aligned} \tag{2.71}$$

Ainsi, avec les opérateurs (2.70), l'hamiltonien en ordre normal est donné par

$$\begin{aligned}
H = E_{HF} &+ \sum_{\sigma} (\epsilon_2 \tilde{n}_{2\sigma} - \epsilon_1 \tilde{n}_{1\sigma}) \\
&+ \frac{U}{2} (\tilde{n}_{2\uparrow} \tilde{n}_{2\downarrow} + \tilde{n}_{1\uparrow} \tilde{n}_{1\downarrow}) - \frac{U}{2} (J_1^+ J_1^- + J_2^+ J_2^-) \\
&+ \frac{U}{2} (J_1^+ J_2^+ + J_2^- J_1^-) - \frac{U}{2} (J_{\uparrow}^+ J_{\downarrow}^- + J_{\uparrow}^- J_{\downarrow}^+)
\end{aligned} \tag{2.72}$$

avec

$$\begin{aligned} E_{HF} &= -2t + \frac{U}{2} , \\ \epsilon_1 &= -t + \frac{U}{2} , \quad \epsilon_2 = t + \frac{U}{2} . \end{aligned} \quad (2.73)$$

Développement des équations *ph* –RPA

Dans la réponse de spin, on définit l'opérateur d'excitation RPA avec des composantes particule-trou de spin opposé comme

$$Q_\nu^\dagger = \sum_{i=1}^2 \mathcal{X}_i^\nu K_i^+ - \mathcal{Y}_i^\nu K_i^- \quad (2.74)$$

avec $K_i^\pm = J_i^\pm / \sqrt{\langle 1 - M_i \rangle}$ et on suit la même démarche du paragraphe (2.2.3). Les éléments de matrice RPA sont donnés par

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{1,1} = 2t &- \frac{U}{2} \frac{\langle (1 - M_1)(1 - M_1) \rangle - \langle (1 - M_1)M_2 \rangle + 2 \left(\langle J_2^- J_1^- \rangle - \langle J_1^+ J_1^- \rangle \right)}{1 - \langle M_1 \rangle} \\ \mathcal{A}_{2,1} = \mathcal{A}_{1,2} &= U \frac{\langle J_1^+ J_2^- \rangle}{\sqrt{(1 - \langle M_1 \rangle)(1 - \langle M_2 \rangle)}} \\ A_{2,2} = 2t &- \frac{U}{2} \frac{\langle (1 - M_2)(1 - M_2) \rangle - \langle (1 - M_2)M_1 \rangle + 2 \left(\langle J_1^- J_2^- \rangle - \langle J_2^+ J_2^- \rangle \right)}{1 - \langle M_2 \rangle} \\ \mathcal{B}_{1,1} &= U \frac{\langle J_1^- J_1^- \rangle - \langle J_2^+ J_1^- \rangle}{1 - \langle M_1 \rangle} \\ \mathcal{B}_{2,2} &= U \frac{\langle J_2^- J_2^- \rangle - \langle J_1^+ J_2^- \rangle}{1 - \langle M_2 \rangle} \\ \mathcal{B}_{1,2} = B_{2,1} &= \frac{U}{2} \frac{\langle (1 - M_1)(1 - M_2) \rangle + 2 \langle J_2^- J_1^- \rangle}{\sqrt{(1 - \langle M_1 \rangle)(1 - \langle M_2 \rangle)}} . \end{aligned} \quad (2.75)$$

D'autre part, la conservation du nombre de particules de spin- σ (2.20), N_σ , nous donne

$$\langle \tilde{n}_{1\sigma} \rangle = \langle \tilde{n}_{2\sigma} \rangle , \quad (2.76)$$

et aussi la conservation de N_σ^2 ,

$$\langle (\tilde{n}_{2\uparrow} - \tilde{n}_{1\uparrow}) (\tilde{n}_{2\downarrow} - \tilde{n}_{1\downarrow}) \rangle = 0 \quad (2.77)$$

nous permet de calculer la valeur moyenne dans l'état RPA des termes qui apparaissent dans l'expression de l'hamiltonien (2.72) et qui sont de la forme

$$\langle \tilde{n}_{2\uparrow} \tilde{n}_{2\downarrow} \rangle + \langle \tilde{n}_{1\uparrow} \tilde{n}_{1\downarrow} \rangle = \langle J_1^+ J_1^- \rangle + \langle J_2^+ J_2^- \rangle . \quad (2.78)$$

En tenant compte des relations d'orthogonalisation et de fermeture, on a

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{1,1} &= \mathcal{A}_{2,2} = A, & A_{2,1} &= A_{1,2} = A', \\ B_{1,1} &= B_{2,2} = B, & B_{2,1} &= B_{1,2} = B', \end{aligned} \quad (2.79)$$

alors la matrice *ph*-RPA prend la même forme analogue à celle de la réponse de charge (2.39),

$$\begin{pmatrix} A & A' & B & B' \\ A' & A & B' & B \\ -B & -B' & -A & -A' \\ -B' & -B & -A' & -A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{X}_1^\nu \\ \mathcal{X}_2^\nu \\ \mathcal{Y}_1^\nu \\ \mathcal{Y}_2^\nu \end{pmatrix} = \mathcal{E}_\nu \begin{pmatrix} \mathcal{X}_1^\nu \\ \mathcal{X}_2^\nu \\ \mathcal{Y}_1^\nu \\ \mathcal{Y}_2^\nu \end{pmatrix}. \quad (2.80)$$

mais il faut signaler que les éléments A , A' , B et B' dans la réponse de spin sont différents de ceux de la réponse de charge (2.39). On a gardé la même nomenclature par commodité. Ainsi, on se retrouve avec un système d'équations qui ressemble à celui du paragraphe (2.2.3). En revanche, l'énergie du fondamental SCRPA est donnée par la valeur moyenne de l'hamiltonien (2.72),

$$E_{SCRPA} = E_{HF} + \sum_{\sigma} (\epsilon_2 \langle \tilde{n}_{2\sigma} \rangle - \epsilon_1 \langle \tilde{n}_{1\sigma} \rangle) + \frac{U}{2} \langle (J_1^+ J_2^+ + J_2^- J_1^-) \rangle. \quad (2.81)$$

En plus, on suppose à priori que la valeur moyenne dans l'état RPA de $\langle (J_\uparrow^+ J_\downarrow^- + J_\uparrow^- J_\downarrow^+) \rangle = 0$, du fait qu'on peut pas l'exprimer en fonction des opérateurs d'excitation de spin. Il va s'avérer que c'est exact.

RPA standard particule-trou

On commence à nouveau par l'application de la RPA standard, c'est à dire on remplace dans les expressions (2.75) l'état fondamental RPA par celui de HF (ceci est équivalent à l'approximation quasi-boson). C'est également équivalent à considérer en (2.75) les deux vecteurs pour $\nu = 1, 2$ comme donné pour $U = 0$

$$\begin{pmatrix} \mathcal{X}_1^1 \\ \mathcal{X}_2^1 \\ \mathcal{Y}_1^1 \\ \mathcal{Y}_2^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \mathcal{X}_1^2 \\ \mathcal{X}_2^2 \\ \mathcal{Y}_1^2 \\ \mathcal{Y}_2^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.82)$$

ce qui implique que $\langle M_i \rangle = 0$. Ainsi, on obtient pour les matrices RPA

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} 2t - \frac{U}{2} & 0 \\ 0 & 2t - \frac{U}{2} \end{pmatrix}, \quad \mathcal{B} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{U}{2} \\ \frac{U}{2} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.83)$$

ce qui nous donne l'énergie d'excitation RPA doublement dégénérée (voir Fig. 2.8),

$$\mathcal{E}_1 = 2t \sqrt{1 - \frac{U}{2t}} \quad , \quad (2.84)$$

On remarque qu'au voisinage de $U = 2$, l'énergie d'excitation de spin tend vers zéro. C'est

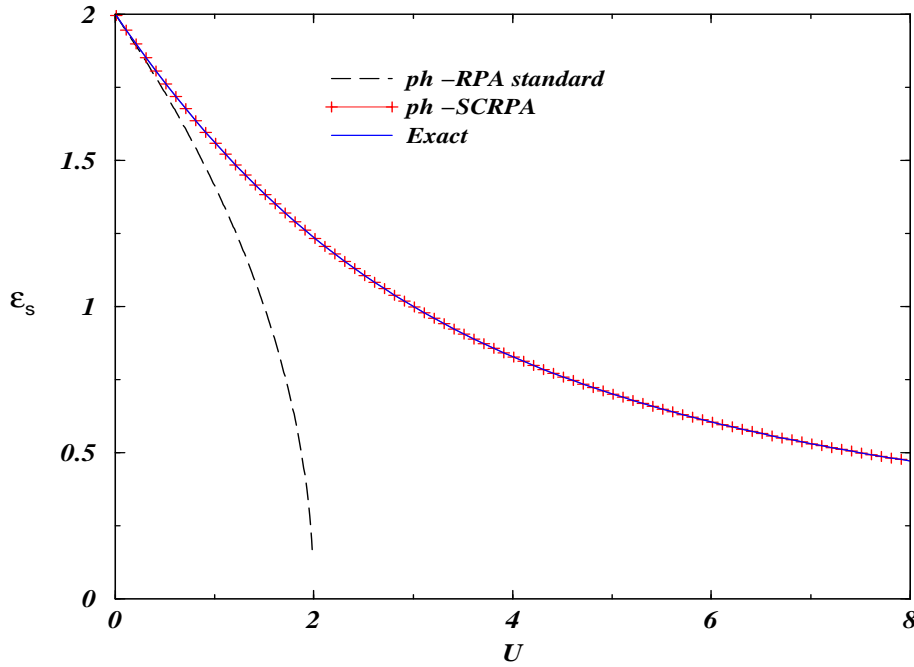


FIG. 2.8 – *Energies d'excitation ph-RPA standard (trait tiré), ph-SCRPA (les croix) et exacte (ligne pleine) dans la réponse de spin pour le cas à 2-sites.*

le signe d'une instabilité de spin. Cette instabilité se produit en fonction de U , au même endroit que pour la réponse de charge, c-à-d pour $U = 2$. On peut calculer les amplitudes RPA analytiquement et l'énergie fondamentale dans l'état RPA (voir Fig. 2.9) est

$$\begin{aligned} E_{RPA} &= E_{HF} - \sum_{\nu} \mathcal{E}_{\nu} \sum_{\sigma} (\mathcal{Y}_{\sigma}^{\nu})^2 \\ &= -2t + \frac{U}{2} - \frac{U^2}{8t} \frac{1}{\left(1 + \sqrt{1 - \frac{U}{2t}}\right)^2} \end{aligned} \quad (2.85)$$

En plus, la limite de E_{RPA} lorsque U tend vers 2^- est finie et vaut $-3t$.

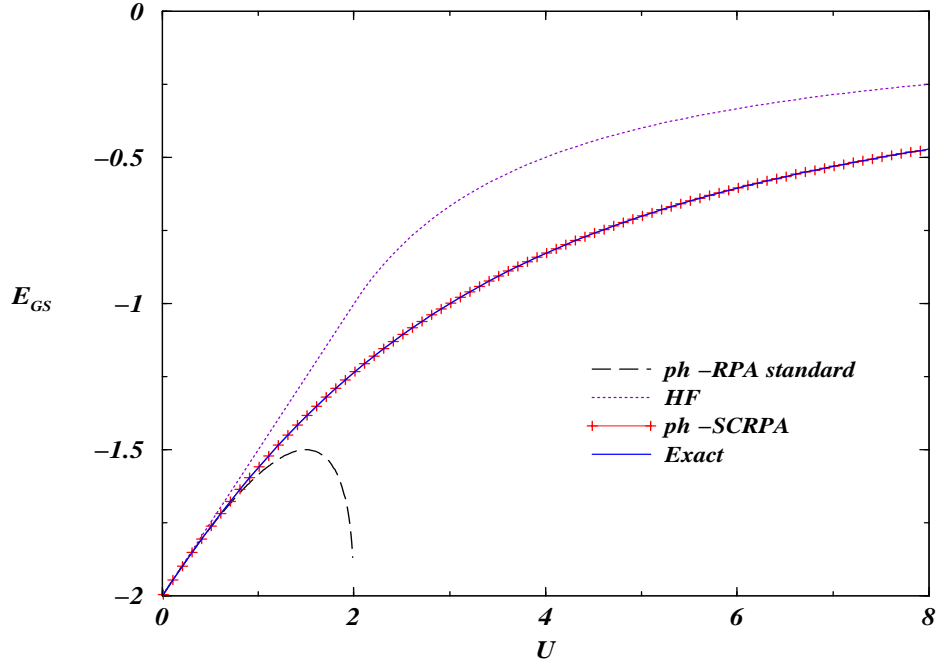


FIG. 2.9 – *Energie du fondamental en approximation HF (en pointillé), ph -RPA (trait tiré), ph -SCRPA (les croix) et exacte (ligne pleine) dans la réponse de spin pour le cas à 2-sites.*

SCRPA particule-trou

Par analogie avec la réponse de charge, on remarque que la résolution du système d'équations par la SCRPA se réduit à quatre amplitudes RPA, en raison de la symétrie,

$$\begin{aligned} \mathcal{X}_1^1 &= -\mathcal{X}_2^1 \equiv x_1, & \mathcal{Y}_1^1 &= -\mathcal{Y}_2^1 \equiv y_1, \\ \mathcal{X}_1^2 &= \mathcal{X}_2^2 \equiv x_2, & \mathcal{Y}_1^2 &= \mathcal{Y}_2^2 \equiv y_2, \end{aligned} \quad (2.86)$$

ce qui nous permet de réécrire les éléments de matrice RPA comme ceci

$$\begin{aligned} A &= 2t - \frac{U}{2} \left[1 + 2(y_2^2 + y_1^2) + x_2 y_2 - x_1 y_1 \right] \\ A' &= \frac{U}{2} (y_2^2 - y_1^2) \\ B' &= \frac{U}{2} \left[1 + 2(y_2^2 + y_1^2) + x_2 y_2 - x_1 y_1 \right] \\ B &= U (y_1^2 - y_2^2 + x_1 y_1 + x_2 y_2) \end{aligned} \quad (2.87)$$

ainsi que l'énergie fondamentale SCRPA,

$$E_{SCRPA} = \frac{-2t + \frac{U}{2} [1 + (y_1^2 + y_2^2 - x_1 y_1 + x_2 y_2)]}{1 + 2(y_2^2 + y_1^2)} \quad (2.88)$$

On initialise le calcul itératif par la solution RPA standard. On remarque de nouveau qu'il y a une convergence rapide de la solution SCRPA vers la solution exacte. Les résultats de la SCRPA sont représentés dans les figures (Fig. 2.8 et Fig. 2.9). On constate que, comme précédemment, le formalisme de la RPA self consistante a reproduit la solution exacte pour l'énergie fondamentale et celles des excitations pour toute valeur de U .

Comme dans le canal de charge, on peut déterminer analytiquement l'état fondamental exact (B.9),

$$|0\rangle = \left(\cos(\phi) - \sin(\phi) J_1^+ J_2^+ \right) |HF\rangle \quad (2.89)$$

ainsi, on peut exprimer toutes les valeurs moyennes qui apparaissent dans l'équation de mouvement en fonction de l'interaction U . En effet, on a

$$\begin{aligned} \langle 0 | \tilde{n}_{i,\sigma} | 0 \rangle &= \langle 0 | \tilde{n}_{i,\sigma} \tilde{n}_{i,\sigma'} | 0 \rangle = \sin^2(\phi) , & \langle 0 | 1 - M_i | 0 \rangle &= 1 - 2 \sin^2(\phi) , \\ \langle 0 | J_i^+ J_i^- | 0 \rangle &= \sin^2(\phi) , \\ \langle 0 | J_i^+ J_i^+ | 0 \rangle &= \langle 0 | J_i^- J_i^- | 0 \rangle = 0 , \\ \langle 0 | J_i^+ J_{i'}^- | 0 \rangle &= 0 & \text{pour } i \neq i' \\ \langle 0 | J_i^+ J_{i'}^+ | 0 \rangle &= \langle 0 | J_i^- J_{i'}^- | 0 \rangle = -\frac{1}{2} \sin(2\phi) & \text{pour } i \neq i' . \end{aligned} \quad (2.90)$$

Ainsi, les éléments de matrice RPA sont donnés par

$$\begin{aligned} A &= 2t - \frac{U}{2} \frac{1 - tg(\phi)}{1 + tg(\phi)} , & A' &= B = 0 , \\ B' &= \frac{U}{2} \frac{1 - tg(\phi)}{1 + tg(\phi)} , \end{aligned} \quad (2.91)$$

et l'énergie d'excitation SCRPA doublement dégénérée (voir Fig. 2.8),

$$\mathcal{E}_1 = 2t \sqrt{1 - \frac{U}{2t} \frac{1 - tg(\phi)}{1 + tg(\phi)}} . \quad (2.92)$$

Ainsi, on a de nouveau exprimé les équations SCRPA comme une équation non-linéaire pour déterminer ϕ . Cette équation est différente de celle du canal de charge. Cependant, elle donne aussi la solution exacte pour toute valeur de U . Notons encore une fois que c'est dans la base invariante de translation que nous avons trouvé ce résultat. De même, l'énergie fondamentale SCRPA (2.81) est exacte et de la forme

$$E_{SCRPA} = -2t \cos(2\phi) + \frac{U}{2} (1 - \sin(2\phi)) \quad (2.93)$$

ce qui est la même expression que celle dans la réponse de charge (2.59) (voir Fig. 2.9). Egalement, le paramètre ϕ est donné par

$$\phi = \arctg \left(\frac{U}{4t + \sqrt{16t^2 + U^2}} \right) . \quad (2.94)$$

2.2.6 Réponse du canal particule-particule

Comme l'on avait déjà expliqué dans le paragraphe (), la RPA peut être formulée soit dans le canal particule-trou (ph), soit dans le canal particule-particule (pp). Ce dernier décrit la diffusion de deux particules (ou deux trous) en présence d'une mer de Fermi et implique les énergies d'excitations des systèmes voisins avec $N \pm 2$ particules. On peut par exemple considérer le propagateur à deux particules

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{12,1'2'}^\omega = & \sum_{\rho(N+2)} \frac{\langle 0 | a_1 a_2 | \rho, N+2 \rangle \langle \rho, N+2 | a_{2'}^\dagger a_{1'}^\dagger | 0 \rangle}{\omega - (E_\rho^{N+2} - E_0^N) + i\eta} \\ & - \sum_{\rho(N-2)} \frac{\langle 0 | a_{2'}^\dagger a_{1'}^\dagger | \rho, N-2 \rangle \langle \rho, N-2 | a_1 a_2 | 0 \rangle}{\omega - (E_0^N - E_\rho^{N-2}) - i\eta} \end{aligned} \quad (2.95)$$

On voit clairement que cette fonction de Green a des pôles à

$$\Omega_\rho^\pm = E_\rho^{N\pm 2} - E_0^{N\pm 2} - 2\mu^\pm, \quad (2.96)$$

où les potentiels chimiques sont définis comme

$$2\mu^\pm = \pm (E_0^{N\pm 2} - E_0^N), \quad (2.97)$$

et les E_ρ^N sont les énergies propres correspondants à l'hamiltonien H en considération.

Nous avons également déjà mentionné à plusieurs reprises que les pôles de la fonction de Green (2.95) peuvent être obtenus pareillement par l'équation du mouvement (EOM) à savoir

$$[H, Q_\rho^\dagger] |0\rangle = \Omega_\rho^\pm Q_\rho^\dagger |0\rangle. \quad (2.98)$$

En fermant cette équation à gauche avec une variation δQ de la manière suivante

$$\langle 0 | [\delta Q, [H, Q_\rho^\dagger]] | 0 \rangle = \Omega_\rho^\pm \langle 0 | [\delta Q, Q_\rho^\dagger] | 0 \rangle, \quad (2.99)$$

nous avons implicitement introduit les deux pôles Ω_ρ^\pm correspondants à ceux de la fonction de Green (2.95). En réalité, on doit, comme au chapitre (1), introduire deux opérateurs Q_ρ^\dagger différents, l'un A_ρ^\dagger qui additionne deux particules et l'autre R_ρ^\dagger qui retranche deux particules du système. Ici nous allons donc considérer comme pour le cas du modèle d'appariement

$$A^\dagger = \mathcal{X}_2 \bar{P}_2^+ - \mathcal{Y}_1 \bar{P}_1^- \quad R^\dagger = -\mathcal{Y}_2 \bar{P}_2^- + \mathcal{X}_1 \bar{P}_1^+ \quad (2.100)$$

avec

$$\begin{aligned} \bar{P}_1^+ &= P_1^+ / \sqrt{1 - \langle M_1 \rangle}, & P_1^+ &= b_{1\uparrow}^\dagger b_{1\downarrow}^\dagger, & M_1 &= \tilde{n}_{1\uparrow} + \tilde{n}_{1\downarrow}, \\ \bar{P}_2^+ &= P_2^+ / \sqrt{1 - \langle M_2 \rangle}, & P_2^+ &= b_{2\uparrow}^\dagger b_{2\downarrow}^\dagger, & M_2 &= \tilde{n}_{2\uparrow} + \tilde{n}_{2\downarrow}, \\ & & \tilde{n}_{i\sigma} &= b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma} \end{aligned} \quad (2.101)$$

et l'état fondamental RPA par

$$A |RPA\rangle = R |RPA\rangle = 0 . \quad (2.102)$$

En plus, les règles de commutations,

$$\begin{aligned} [P_i^-, P_{i'}^+] &= -2 P_i^0 \delta_{ii'} , \\ [M_i, P_{i'}^\pm] &= \pm \delta_{ii'} 2 P_i^\pm , \end{aligned} \quad (2.103)$$

avec $2 P_i^0 = M_i - 1$, nous donnent les relations d'orthogonalisation et de fermeture

$$\begin{aligned} \mathcal{X}_i^2 - \mathcal{Y}_i^2 &= 1 , & \mathcal{X}_2 \mathcal{Y}_2 - \mathcal{X}_1 \mathcal{Y}_1 &= 0 , & \mathcal{X}_1 \mathcal{Y}_2 - \mathcal{X}_2 \mathcal{Y}_1 &= 0 \\ \Rightarrow \quad \mathcal{X}_1 &= \pm \mathcal{X}_2 = \mathcal{X} , & \mathcal{Y}_1 &= \pm \mathcal{Y}_2 = \mathcal{Y} \end{aligned} \quad (2.104)$$

Ainsi, on peut inverser les relations (2.100) et exprimer les opérateurs P_i^\pm en fonction de A et R ,

$$P_2^+ = \sqrt{1 - \langle M_2 \rangle} (\mathcal{X} A^\dagger + \mathcal{Y} R) \quad P_1^- = \sqrt{1 - \langle M_1 \rangle} (\mathcal{Y} A^\dagger + \mathcal{X} R) , \quad (2.105)$$

avec les règles de commutations suivantes

$$\begin{aligned} [R, R^\dagger] &= -Y_2^2 \frac{1 - M_2}{1 - \langle M_2 \rangle} + X_1^2 \frac{1 - M_1}{1 - \langle M_1 \rangle} , \\ [A, A^\dagger] &= X_2^2 \frac{1 - M_2}{1 - \langle M_2 \rangle} - Y_1^2 \frac{1 - M_1}{1 - \langle M_1 \rangle} , \\ [A, R] &= -X_2 Y_2 \frac{1 - M_2}{1 - \langle M_2 \rangle} + Y_1 X_1 \frac{1 - M_1}{1 - \langle M_1 \rangle} , \\ [M_2, R] &= -2 Y_2 (X_2 A^\dagger + Y_2 R) \\ [M_1, A^\dagger] &= 2 Y_1 (Y_2 A^\dagger + X_1 R) \end{aligned} \quad (2.106)$$

telles que leurs valeurs moyennes dans l'état RPA,

$$\begin{aligned} \langle [R, R^\dagger] \rangle &= \langle [A, A^\dagger] \rangle = 1 , \\ \langle [A, R] \rangle &= \langle [M_2, R] \rangle = \langle [M_1, A^\dagger] \rangle = 0 . \end{aligned} \quad (2.107)$$

D'autre part, les opérateurs P_i^\pm et P_i^0 forment une algèbre $SU(2)$, c'est à dire ils vérifient les relations de commutations (2.103). Ainsi pour des fermions de spin- $\frac{1}{2}$, la relation de Casimir

$$(\mathbf{P}_i)^2 = (P_i^0)^2 + \frac{1}{2} (P_i^+ P_i^- + P_i^- P_i^+) , \quad (2.108)$$

nous donne l'égalité suivante

$$P_i^+ P_i^- + P_i^- P_i^+ = 1 , \quad (2.109)$$

car $(\mathbf{P}_i)^2 = p(p+1) = \frac{3}{4}$ et $(P_i^0)^2 = \frac{1}{4}$. Ceci permet calculer les valeurs moyennes suivantes

$$\langle P_i^+ P_i^- \rangle = (1 - \langle M_i \rangle) \mathcal{Y}^2, \quad \langle P_i^+ P_{i'}^+ \rangle = \langle P_{i'}^- P_i^- \rangle = \sqrt{1 - \langle M_i \rangle} \sqrt{1 - \langle M_{i'} \rangle} \mathcal{X} \mathcal{Y},$$

$$\langle P_1^+ P_2^- \rangle = \langle P_2^+ P_1^- \rangle = 0, \quad \langle M_i \rangle = 1 - \frac{1}{1 + 2 \mathcal{Y}^2}, \quad \langle M_i M_i \rangle = 2 \langle M_i \rangle,$$

$$\langle M_1 M_2 \rangle = \langle M_1 \rangle + \langle M_2 \rangle - 2 \langle P_2^+ P_1^- P_1^+ P_2^- \rangle - 2 \langle P_1^+ P_2^- P_2^+ P_1^- \rangle. \quad (2.110)$$

et les valeurs moyennes de type $\langle P_i^+ P_j^- P_j^+ P_i^- \rangle$ sont données dans l'annexe (A.2). Finalement, on peut résoudre le système d'équation de mouvement pp -RPA qui est donnée par la forme matricielle suivante

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A} & \mathcal{B} \\ -\mathcal{B} & -\mathcal{C} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{X} \\ \mathcal{Y} \end{pmatrix} = \Omega \begin{pmatrix} \mathcal{X} \\ \mathcal{Y} \end{pmatrix}. \quad (2.111)$$

avec

$$\begin{aligned} \mathcal{A} &= \langle [\bar{P}_2^-, [H', \bar{P}_2^+]] \rangle, & \mathcal{B} &= -\langle [\bar{P}_2^-, [H', \bar{P}_1^-]] \rangle, \\ \mathcal{C} &= \langle [\bar{P}_1^+, [H', \bar{P}_1^-]] \rangle. \end{aligned} \quad (2.112)$$

Dans la région sphérique, l'hamiltonien en fonction des opérateurs à deux particules est donné par

$$\begin{aligned} H' &= H - \mu \sum_{k\sigma} \hat{n}_{k\sigma} \\ &= E_{HF} - 2\mu + (\epsilon_2 - \mu) M_2 - (\epsilon_1 - \mu) M_1 - \eta \frac{U}{2} (\tilde{n}_{2\uparrow} \tilde{n}_{1\uparrow} + \tilde{n}_{1\downarrow} \tilde{n}_{2\downarrow}) \\ &\quad + \frac{U}{2} (P_2^+ P_2^- + P_1^+ P_1^- + P_1^- P_2^- + P_2^+ P_1^+) + H_r \\ H_r &= \frac{U}{2} (J_1^+ J_2^- + J_2^+ J_1^-), \end{aligned} \quad (2.113)$$

avec

$$\begin{aligned} E_{HF} &= -2t + \frac{U}{2}, & \mu &= \frac{U}{2} \\ \epsilon_1 &= -t + \frac{U}{2}, & \epsilon_2 &= t + \frac{U}{2}. \end{aligned} \quad (2.114)$$

Dans ce cas, on introduit un potentiel chimique, μ , pour avoir la symétrie particule-trou, c'est à dire pour que la matrice \mathcal{A} soit égale à la matrice \mathcal{C} . Ainsi, on obtient pour les éléments de matrice RPA

$$\mathcal{A} = 2t + U - 2\mu$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{U}{2} \frac{\langle (1 - M_2) (1 - M_2) \rangle - \eta \langle M_1 (1 - M_2) \rangle - 2 \left(\langle P_1^- P_2^- \rangle + \langle P_2^+ P_2^- \rangle \right)}{1 - \langle M_2 \rangle} \\
\mathcal{B} &= \frac{U}{2} \frac{\langle (1 - M_2) (1 - M_1) \rangle - 2\eta \langle P_1^- P_2^- \rangle}{\sqrt{(1 - \langle M_1 \rangle) (1 - \langle M_2 \rangle)}} \quad (2.115)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{C} &= 2t + U - 2\mu \\
& + \frac{U}{2} \frac{\langle (1 - M_1) (1 - M_1) \rangle - \eta \langle M_2 (1 - M_1) \rangle - 2 \left(\langle P_1^- P_2^- \rangle + \langle P_1^+ P_1^- \rangle \right)}{1 - \langle M_1 \rangle}
\end{aligned}$$

Il faut signaler que le terme H_r de l'hamiltonien (2.113) ne contribue pas aux éléments de matrice SCRPA et on montre que sa valeur moyenne dans l'état SCRPA est aussi nulle. D'autre part, on introduit le coefficient η pour mieux discuter l'apport des termes de produits de densités en (2.113) dans la résolution du système d'équations SCRPA. En réalité $\eta = 1$, le système d'équation SCRPA (2.111) est fermé avec les expressions (2.110) et on peut donc résoudre par itération. On remarque donc que l'hamiltonien (2.113) est assez analogue à celui du modèle de Richardson sauf qu'il y a en plus les termes de produits de densités n_k et que la force d'interaction est répulsive.

RPA standard particule-particule

Comme d'habitude, on commence par l'application de la RPA standard, où en utilisant l'approximation quasi-boson (en remplaçant l'état RPA par celui de HF dans (2.115)). Dans ce cas, les éléments de matrice pp -RPA sont de la forme

$$\mathcal{A} = 2t + \frac{U}{2}, \quad \mathcal{B} = \frac{U}{2}, \quad \mathcal{C} = 2t + \frac{U}{2}. \quad (2.116)$$

ce qui nous donne l'énergie d'excitation RPA standard,

$$\Omega_{RPA} = 2t \sqrt{1 + \frac{U}{2t}}, \quad (2.117)$$

avec les amplitudes RPA standard correspondantes

$$\mathcal{X} = \frac{U}{2\sqrt{(4t+U)(2t-\sqrt{4t+2U})}}, \quad \mathcal{Y} = -\frac{U}{4t} \frac{4t+U-\sqrt{2t+U}}{\sqrt{(4t+U)(2t-\sqrt{4t+2U})}}. \quad (2.118)$$

Ceci est à comparer avec l'énergie exacte du premier état excité (voir Fig. 2.10) qui est donnée par

$$\Omega_{exact} = \langle 4p | H' | 4p \rangle - \langle 2p | H' | 2p \rangle = 2\mu - E_0, \quad (2.119)$$

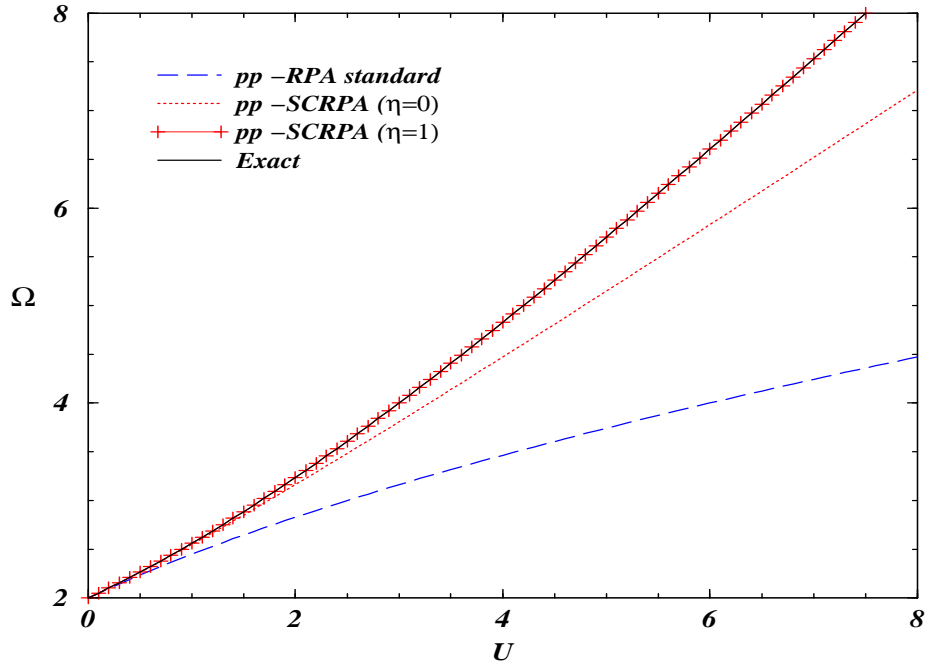


FIG. 2.10 – Valeur propre Ω *pp* -RPA standard, *pp* -SCRPA (pour $\eta = 1$) et celle exacte (qui est confondue avec la solution SCRPA pour toute valeur de U) en fonction de U dans la région sphérique.

où $|4p\rangle$ et $|2p\rangle$ sont les états fondamentaux des systèmes à deux sites avec quatre et deux particules, respectivement. L'énergie E_0 est celle du fondamental du système avec 2-particules. On remarque que, pour les 2 sites, la valeur moyenne $\langle 4p|H'|4p\rangle = 0$. L'énergie du fondamental est donnée par

$$E_{RPA} = E_{HF} - 2\Omega_{RPA} \mathcal{Y}^2 . \quad (2.120)$$

On donne les résultats pour l'énergie d'excitation et du fondamental en *pp* -RPA dans les figures Fig. (2.10) et Fig. (2.11), respectivement. On voit bien que la solution RPA standard est en bon accord avec la solution exacte seulement pour des très petites valeurs de l'interaction U .

SCRPA particule-particule

La RPA self consistante particule-particule consiste donc à calculer toutes les fonctions de corrélations qui apparaissent dans ce canal (pp). En plus, on a $\langle M_1 M_2 \rangle = \langle M_1 \rangle + \langle M_2 \rangle =$

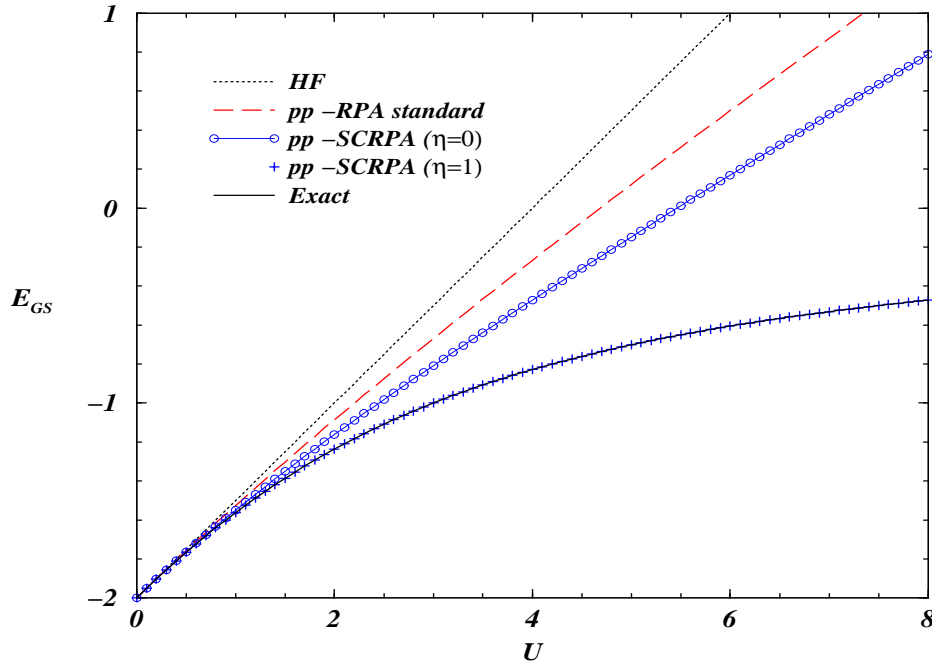


FIG. 2.11 – Energies du fondamental HF, pp -RPA, pp -SCRPA et exacte dans la région sphérique pour le cas à 2-sites.

$2\langle M \rangle$. En effet, on a le système très simple d'équations SCRPA pour $\eta = 1$,

$$\begin{aligned} \mathcal{A} &= 2t + \frac{U}{2} (\mathcal{X} - \mathcal{Y})^2, \quad \mathcal{B} = \frac{U}{2} (\mathcal{X} - \mathcal{Y})^2, \quad \Omega_{SCRPA} = 2t \sqrt{1 + \frac{U}{2t} (\mathcal{X} - \mathcal{Y})^2}, \\ \mathcal{X}_{SCRPA} &= \frac{\mathcal{A} + \Omega_{SCRPA}}{\sqrt{(\mathcal{A} + \Omega_{SCRPA})^2 - \mathcal{B}^2}}, \quad \mathcal{Y}_{SCRPA} = \frac{-\mathcal{B}}{\sqrt{(\mathcal{A} + \Omega_{SCRPA})^2 - \mathcal{B}^2}}. \end{aligned} \quad (2.121)$$

ce qui constitue bien un système d'équations self consistantes. Ainsi, on trouve la solution pour la valeur propre Ω_{SCRPA} pour $\eta = 1$ comme montré sur la figure (Fig. 2.10). En plus, on donne l'énergie fondamentale SCRPA sur la figure (Fig. 2.11),

$$E_{SCRPA} = \frac{-2t + U (\mathcal{X} + \mathcal{Y})^2}{1 + 2\mathcal{Y}^2}. \quad (2.122)$$

On remarque que pour $\eta = 1$ on retrouve, comme précédemment dans le canal ph , la solution exacte pour toute valeur de U ainsi que pour le fondamental et l'état excité. Par contre, pour $\eta = 0$, on voit bien l'importance des termes de produit de densités pour $U \geq 2$, c-à-d des corrélations de types ph .

D'autre part, on peut vérifier ce calcul connaissant l'état fondamental exact (B.9). On peut le réécrire sous la forme suivante

$$|0\rangle = \left(\cos(\phi) - \sin(\phi) P_2^+ P_1^+ \right) |HF\rangle \quad (2.123)$$

avec $tg(\phi) = \frac{U}{4t + \sqrt{16t^2 + U^2}}$, et qui obeit aux conditions,

$$A |0\rangle = R |0\rangle = 0 . \quad (2.124)$$

Ainsi, on peut calculer facilement le rapport

$$\frac{\mathcal{Y}}{\mathcal{X}} = tg(\phi) \quad (2.125)$$

et avec les conditions de normalisation et de fermeture (2.104), on donne les amplitudes SCRPA

$$\mathcal{X} = \frac{1}{\sqrt{1 - tg^2(\phi)}} , \quad \mathcal{Y} = -\frac{tg(\phi)}{\sqrt{1 - tg^2(\phi)}} . \quad (2.126)$$

Finalement, on peut exprimer toutes les valeurs moyennes qui apparaissent dans l'équation de mouvement en fonction de l'interaction U . En effet, on donne

$$\begin{aligned} \langle 0 | \tilde{n}_{i,\sigma} | 0 \rangle &= \langle 0 | \tilde{n}_{i,\sigma} \tilde{n}_{i,-\sigma} | 0 \rangle = \sin^2(\phi) , & \langle 0 | 1 - M_i | 0 \rangle &= 1 - 2 \sin^2(\phi) , \\ \langle 0 | P_i^+ P_i^- | 0 \rangle &= \sin^2(\phi) , & \langle 0 | P_1^+ P_2^- | 0 \rangle &= \langle 0 | P_2^+ P_1^- | 0 \rangle = 0 , \\ \langle 0 | P_i^+ P_{i'}^+ | 0 \rangle &= \langle 0 | P_i^- P_{i'}^- | 0 \rangle = -\frac{1}{2} \sin(2\phi) . \end{aligned} \quad (2.127)$$

Ainsi, les éléments de matrice RPA sont donnés par

$$\mathcal{A} = \mathcal{C} = 2t - \frac{U}{2} + U \frac{1 + 2tg(\phi)}{1 - tg^2(\phi)} , \quad \mathcal{B} = \frac{U}{2} \frac{1 + tg(\phi)}{1 - tg(\phi)} , \quad (2.128)$$

et les énergies d'excitations par

$$\Omega_{SCRPA} = \sqrt{\mathcal{A}^2 - \mathcal{B}^2} , \quad (2.129)$$

En plus, l'énergie fondamentale SCRPA (2.43) est donnée par

$$\begin{aligned} E_{SCRPA} &= E_{HF} + \epsilon_2 \langle 0 | M_2 | 0 \rangle - \epsilon_1 \langle 0 | M_1 | 0 \rangle - \frac{U}{2} (\langle 0 | \tilde{n}_{2\uparrow} \tilde{n}_{1\downarrow} | 0 \rangle + \langle 0 | \tilde{n}_{1\uparrow} \tilde{n}_{2\downarrow} | 0 \rangle) \\ &\quad + \frac{U}{2} \langle 0 | (P_2^+ P_2^- + P_1^+ P_1^- + P_1^- P_2^- + P_2^+ P_1^+) | 0 \rangle \\ &= -2t \cos(2\phi) + \frac{U}{2} (1 - \sin(2\phi)) . \end{aligned} \quad (2.130)$$

En conclusion, on retrouve encore une fois la solution exacte dans ce canal (voir Tab. 2.4 et Tab. 2.3)

U	\mathcal{E}_1^{ph-RPA}	$\mathcal{E}_1^{ph-SCRPA}$	\mathcal{E}_1^{exact}
0.0	2.00000000	2.00000000	2.00000000
0.5	1.73606801	1.76556438	1.76556444
1.0	1.44948971	1.56155287	1.56155281
1.5	1.14575136	1.38600085	1.38600094
2.0	0.82842714	1.23606780	1.23606798
2.5	0.50000000	1.10849537	1.10849528
3.0	0.16227765	1.00000000	1.00000000
3.5	-0.18337521	0.90753610	0.90753645
4.0	-0.53589839	0.82842701	0.82842712
4.5	-0.89444870	0.76039874	0.76039864
5.0	-1.25834262	0.70156262	0.70156212
5.5	-1.62701666	0.65036737	0.65036763
6.0	-2.00000000	0.60555133	0.60555128

TAB. 2.3 – Comparaison des résultats de la pp -RPA standard, pp -SCRPA et exacts pour le premier état excité dans la base sphérique.

U	E_{GS}^{HF}	E_{GS}^{exact}	$E_{GS}^{pp-SCRPA}$
0.0	-2.00000000	-2.00000000	-2.00000000
0.5	-1.75000000	-1.76556444	-1.76556444
1.0	-1.50000000	-1.56155281	-1.56155281
1.5	-1.25000000	-1.38600094	-1.38600094
2.0	-1.00000000	-1.23606798	-1.23606798
2.5	-0.80000000	-1.10849528	-1.10849528
3.0	-0.66666667	-1.00000000	-1.00000000
3.5	-0.57142857	-0.90753645	-0.90753645
4.0	-0.50000000	-0.82842712	-0.82842712
4.5	-0.44444444	-0.76039864	-0.76039864
5.0	-0.40000000	-0.70156212	-0.70156212
5.5	-0.36363636	-0.65036763	-0.65036763
6.0	-0.33333333	-0.60555128	-0.60555128

TAB. 2.4 – Comparaisons des résultats de l'approximation HF, pp -RPA standard, pp -SCRPA et exacts pour l'énergie fondamentale dans la base sphérique.

2.3 Règle de somme pondérée par l'énergie

Dans le but de tester notre approche, on doit regarder la règle de somme pondérée par l'énergie (RSPE). Comme il est bien connu, si les états $|0\rangle$ et $|\nu\rangle$ sont des états propres exacts de l'Hamiltonien avec les énergies propres E_0 et E_ν , l'égalité suivante est bien satisfaite [37] :

$$\sum_{\nu} (E_{\nu} - E_0) |\langle \nu | F | 0 \rangle|^2 = \frac{1}{2} \langle 0 | [F, [H, F]] | 0 \rangle \quad (2.131)$$

Où F est un opérateur hermitique à une particule,

$$F = \sum_{\alpha\beta} f_{\alpha\beta} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta} . \quad (2.132)$$

L'égalité (2.131) est en général violée du fait qu'on calcule les quantités $|0\rangle$, $|\nu\rangle$, E_0 et E_{ν} avec une approximation. Pour la RPA standard, cette égalité est satisfaite [37], si on calcule le membre de gauche en s-RPA et le membre de droite avec l'état $|HF\rangle$. Egalement, si on évalue (2.131) en SCRPA, on peut s'attendre à ce que la relation est satisfaite puisque la SCRPA résoud le problème à deux électrons exactement, comme on vient de le voir. Néanmoins, il est satisfaisant de voir dériver cette égalité explicitement. Nous allons prendre comme opérateur du transition

$$F = \sum_{\sigma} (J_{\sigma}^{+} + h.c) , \quad (2.133)$$

(voir 2.16). Le membre de gauche, MG , est facile à calculer et donne

$$\begin{aligned} MG &\equiv \sum_{\nu} (E_{\nu} - E_0) |\langle \nu | F | 0 \rangle|^2 \\ &= \sum_{\nu} (E_{\nu} - E_0) |\langle 0 | Q_{\nu} F | 0 \rangle|^2 \\ &= \sum_{\nu} (E_{\nu} - E_0) |\langle 0 | Q_{\nu} F | 0 \rangle|^2 \\ &= \sum_{\nu} (E_{\nu} - E_0) |\langle 0 | [Q_{\nu}, F] | 0 \rangle|^2 \\ &= \sum_{\nu} (E_{\nu} - E_0) \left| \sum_{\sigma} \sqrt{1 - M_{\sigma}} (\mathcal{X}_{\sigma}^{\nu} + \mathcal{Y}_{\sigma}^{\nu}) \right|^2 \end{aligned} \quad (2.134)$$

qui est formellement égale au résultat RPA standard apart le facteur $\sqrt{1 - M_{\sigma}}$. D'autre part, l'équation de mouvement RPA et les propriétés des amplitudes RPA nous permettent de réécrire (2.131) comme

$$MD \equiv \frac{1}{2} \langle 0 | [F, [H, F]] | 0 \rangle = \sum_{\nu} \sqrt{1 - M_{\sigma}} \sum_{\sigma'} \sqrt{1 - M_{\sigma'}} (\mathcal{A}_{\sigma, \sigma'} - \mathcal{B}_{\sigma, \sigma'}) . \quad (2.135)$$

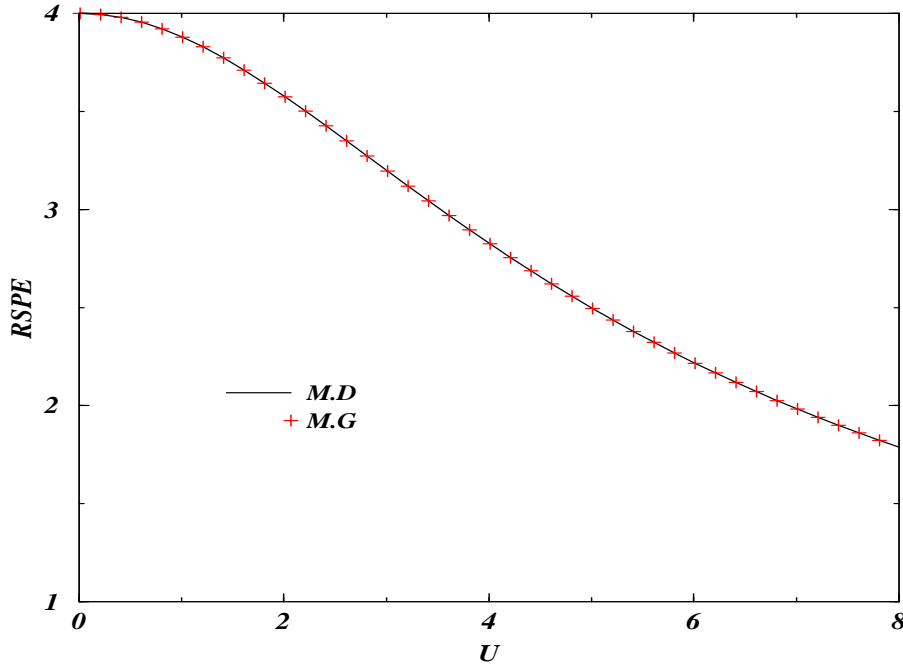


FIG. 2.12 – Règle de somme pondérée par l'énergie dans la réponse de charge pour le cas à 2-sites. On note par $M.D$ et $M.G$ les membres de droite et de gauche de l'égalité (2.131) qui sont calculés avec la SCRPA.

Nous présentons les résultats de la règle de somme pour le cas à deux sites dans la réponse de charge (Fig. 2.12). On remarque bien que le membre de gauche, MG , est parfaitement égale à celui de droite, MD pour toute valeur de U . Ceci montre bien que la règle de somme est bien satisfaite dans ce canal. De même, dans le canal réponse de spin, la règle de somme est bien satisfaite aussi (Fig.2.13).

En revanche, dans le canal pp , on doit choisir F comme un opérateur qui ajoute deux particules car le fondamental $|0\rangle$ correspond au système à $N + 2$ -particules. Ainsi, l'opérateur F est donné par

$$F = \sum_i \left(P_{p_i}^+ + h.c \right) . \quad (2.136)$$

De même, on développe l'égalité (2.131) avec l'opérateur (2.136). On obtient la même forme d'expression pour les deux membres de (2.131) qui sont donnés par (2.134) et (2.135) sauf que les amplitudes RPA \mathcal{X}, \mathcal{Y} , les matrices \mathcal{A}, \mathcal{B} et les valeurs propres E_ν, E_0 sont obtenues dans le canal pp . On présente les résultats obtenus dans ce canal dans la figure (Fig.2.14). On voit bien que la règle de somme est aussi satisfaite.

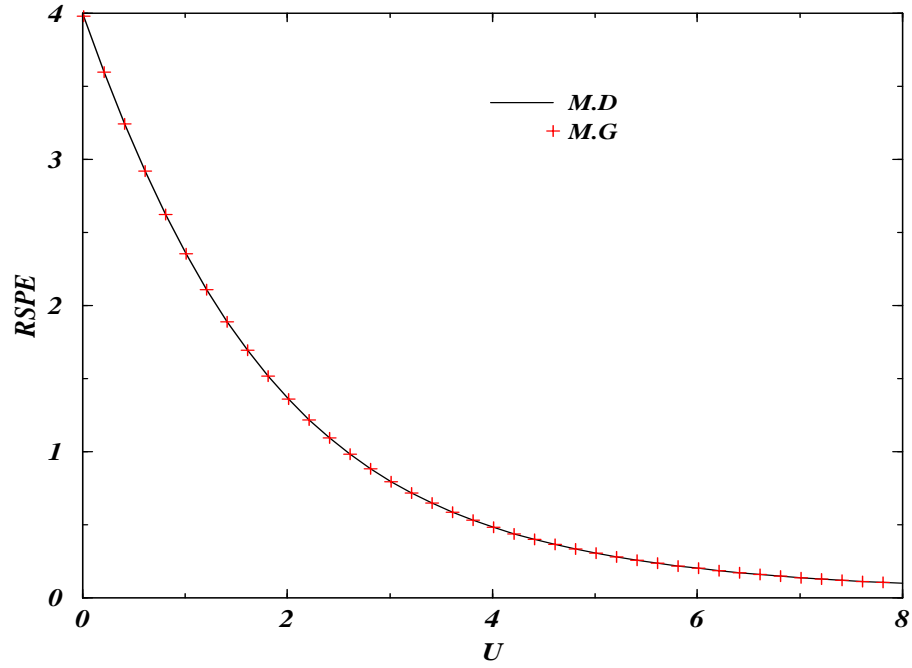


FIG. 2.13 – Règle de somme pondérée par l'énergie dans la réponse de spin pour le cas à 2-sites. On note par $M.D$ et $M.G$ les membres de droite et de gauche de l'égalité (2.131) qui sont calculés avec la SCRPA.

Bien entendu, on peut vérifier analytiquement que $MG = MD$ en remplaçant tous les éléments $(\mathcal{X}, \mathcal{Y}, \mathcal{A}, \mathcal{B}, E_\nu, E_0)$ par leurs expressions en fonction de ϕ dans les trois règles de sommes mentionnées ci-dessus.

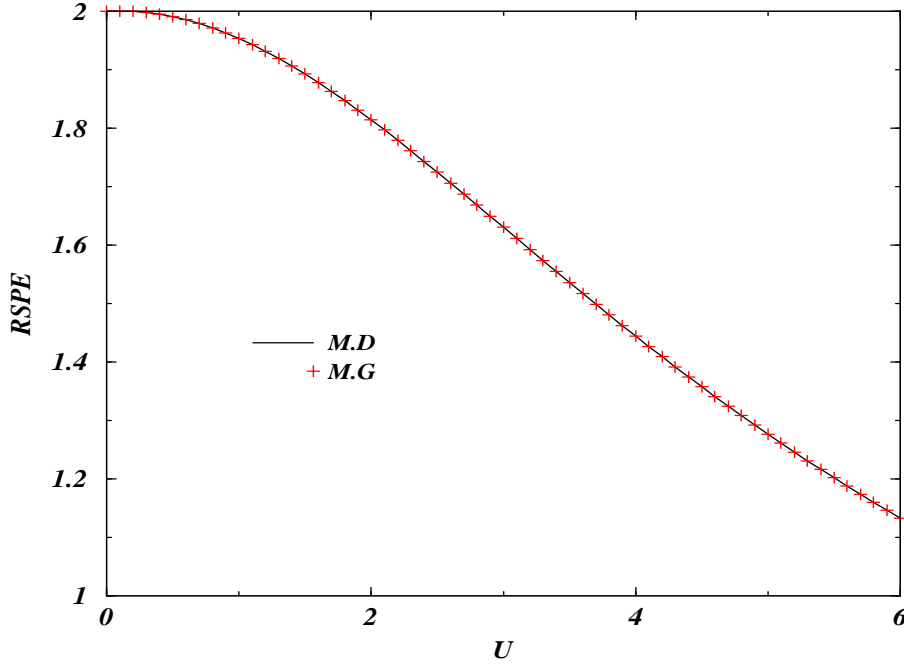


FIG. 2.14 – Règle de somme pondérée par l'énergie pour le canal particule-particule pour le cas à 2-sites. On note par *M.D* et *M.G* les membres de droite et de gauche de l'égalité (2.131) qui sont calculés avec la SCRPA.

2.4 Comparaison avec d'autres méthodes

Dans la littérature, il existe d'autres méthodes qui ont été inventées afin de traiter les problèmes à N-corps et principalement les systèmes de fermions fortement corrélés issu de la méthode des équations de mouvement. Dans ce contexte, on a trouvé la même étude du modèle de Hubbard à 2-sites demi-plein par la méthode GW [39] (GW: Approximation auto-cohérente pour la fonction de Green, \mathcal{G} , faisant appel au potentiel écranté, W). Cette méthode connaît actuellement un grand succès en physique des solides. Elle se base essentiellement sur un développement de la fonction de Green où on présente la fonctionnelle d'énergie de Luttinger–Ward (LW) dans la formulation à température zéro comme [40, 41]

$$E_{LW}[\mathcal{G}] = T[\mathcal{G}] + \Phi[\mathcal{G}] \quad (2.137)$$

où, T est le terme de l'énergie cinétique et Φ est l'énergie potentiel qui contient les termes de Hartree, d'échange et de corrélations. \mathcal{G} est la fonction de Green à un corps. La minimisation de cette fonctionnelle d'énergie (2.137) par rapport à \mathcal{G} , $\frac{\delta E_{LW}}{\delta \mathcal{G}} = 0$, nous

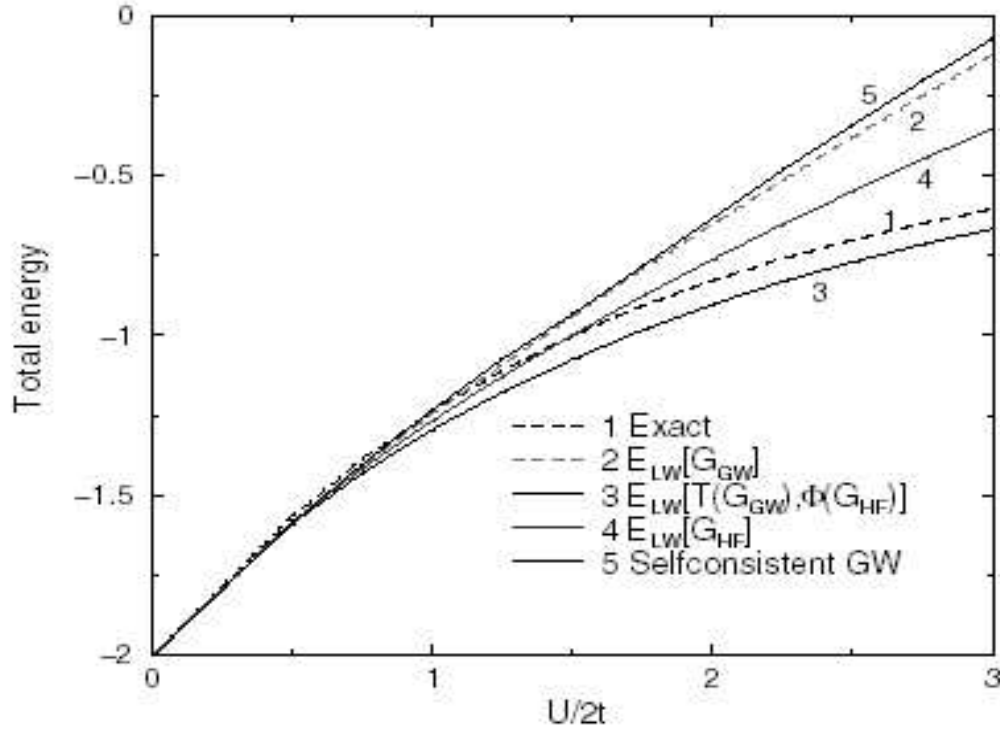


FIG. 2.15 – *Energie fondamentale du modèle de Hubbard à 2-sites en fonction de $\frac{U}{2t}$ [39]. “1” représente la solution exacte. “2” est la solution de la fonctionnelle LW (2.137) avec la méthode GW standard. “3” représente la solution de (2.137) avec la GW standard pour l’énergie cinétique et G_{HF} pour l’interaction. “4” représente la solution de (2.137) avec G_{HF} . “5” représente la solution de (2.137) avec la GW self consistante.*

donne l’équation de Dyson

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}_0 + \mathcal{G}_0 M \mathcal{G} \quad (2.138)$$

où \mathcal{G}_0 est la fonction de Green d’un système de particules libres et M est l’opérateur de masse qui est donné par

$$M = -\frac{\delta \Phi}{\delta \mathcal{G}}. \quad (2.139)$$

La résolution de ce système d’équation par la méthode GW pour le modèle de Hubbard à deux sites demi-plein donne les résultats présentés sur la figure (Fig;2.15). On remarque que le résultat de la GW self consistante est en bonne accord avec la solution exacte jusqu’à $U = 2t$. Par ailleurs, elle s’éloigne fortement de celle-ci. En revanche, rappelons que la SCRPA a reproduit la solution exacte pour toute valeur de U .

D'autre part, il y a un autre développement de Vilk et Tremblay qui s'appelle Approximation TPSC (‘‘ Two-particle self-consistent ’’) [42, 43, 44, 45, 46]. Cette approche est basée entre autres sur des règles de somme qui permettent d'assurer une cohérence entre un vertex irréductible approximatif et les fonctions de corrélation à deux particules, d'où le nom de l'approche : Approximation TPSC. Cette approche a une certaine affinité avec la SCRPA dans le sens qu'une interaction effective, $U_{eff} = U \frac{\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle}{\langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle}$, est également introduite. Mais, comme on peut le voir, les détails sont complètement différents et en fait on ne peut pas appliquer la TPSC à température zéro et/ou à des systèmes en 1-dimension [47].

Le développement avec la fonction d'onde variationnelle de Gutzwiller est présenté en [48]. Cette approche dite approximation de Gutzwiller (GA) a été appliquée sur le modèle de Hubbard à deux sites demi-plein. Les auteurs du papier [48] ont obtenu le résultat mentionné sur la figure (Fig.2.16). On remarque aussi que cette approximation est loin d'être en mesure de tenir compte des corrélations du fait que l'énergie fondamentale obtenue s'éloigne de la solution exacte pour $U \geq 2$. Grosso modo, elle a le comportement de la solution s-RPA (ou HF+RPA).

2.5 Conclusion

L'étude du modèle de Hubbard à deux sites, nous a permis de tester l'approximation RPA self consistante (SCRPA) en la comparant à la solution exacte. A notre grande satisfaction nous avons trouvé que la SCRPA résout ce problème exactement pour toute valeur de l'interaction U . Et ceci dans différents canaux tels que le canal ph (réponse de charge et de spin) et le canal pp . Ceci est donc un point de départ prometteur car habituellement les approximations du problème à N -corps se détériorent en passant aux systèmes à un nombre de particules réduit. Nous avons vu ceci explicitement en présentant les résultats donnés par la GW (voir Fig.2.15) que nous avons tiré d'une publication récente [39], en discutant les travaux de Vilk et Tremblay [42, 43, 44, 45, 46] et en considérant une application avec la fonction d'onde de Gutzwiller [48].

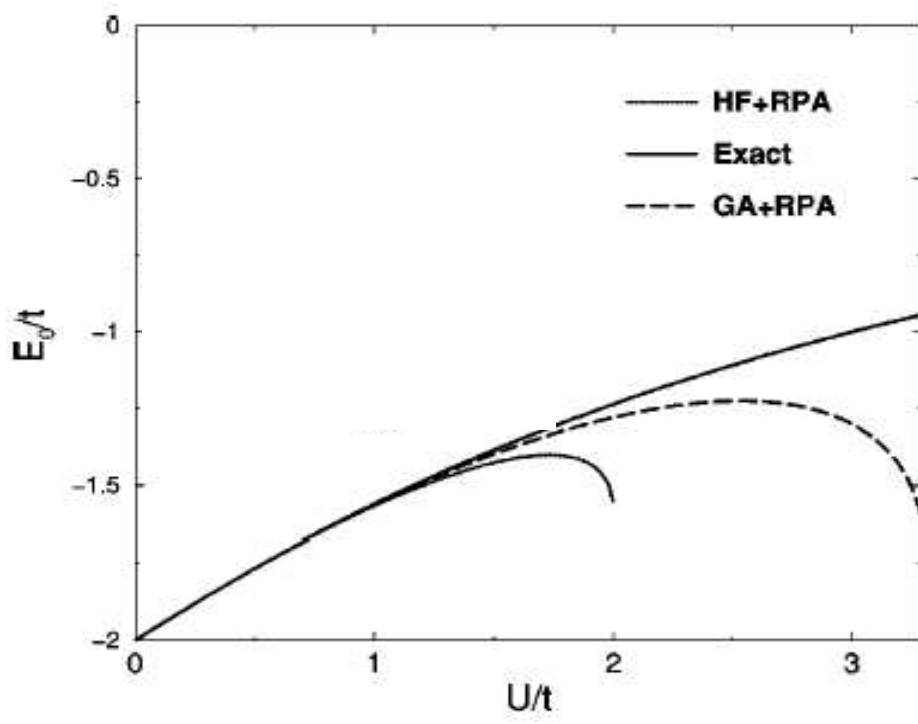


FIG. 2.16 – Comparaison de la solution $GA+RPA$, $HF+RPA$ et exacte pour l'énergie fondamentale du modèle de Hubbard à 2-sites. Egalement, on représente l'occupation double comme une fonction de $\frac{U}{t}$ avec les mêmes approches.

Chapitre 3

Modèle de Hubbard à six-sites

Dans ce chapitre, nous passons directement au cas à 6 sites. Le cas à quatre sites pose quelques problèmes particuliers et nous le traiterons dans le chapitre suivant (Chap.4). Egalement, nous nous contenterons dans ce chapitre de rester dans la phase qui ne brise pas la symétrie de translation, c'est à dire il n'y aura pas de magnétisation non nulle. Nous avons vu dans le chapitre précédant que pour deux sites la base non brisée permettait de retrouver le résultat exact pour toute valeur de U . Pour les six sites, les résultats ne seront évidemment plus exacts et le formalisme SCRPA constituera une, comme on le verra, très bonne approximation. Cependant, contrairement au cas à deux sites nous ne pouvons pas résoudre les équations non-linéaires pour toute valeurs de U . La transition de phase commence à se faire sentir. Malgré cela, nous allons pouvoir largement dépasser la valeur où la RPA standard montre une instabilité. La théorie SCRPA dans la phase avec une symétrie brisée a été aussi développée [10] mais elle présente encore quelques défauts si bien que nous allons nous restreindre à la phase "sphérique" dans ce chapitre. Avec l'application de la SCRPA au cas à six sites, nous allons procéder en analogie avec le cas à deux sites. On considère une chaîne linéaire à 6-sites demi-pleine avec la projection de spin $m_s = 0$. D'abord, on utilise la transformation qui conserve la symétrie de translation telle que la transformation de Fourier

$$c_{j,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},\sigma} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_j} . \quad (3.1)$$

L'hamiltonien se transforme comme

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{p},\mathbf{q}} a_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\uparrow} a_{\mathbf{p},\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{p}-\mathbf{q},\downarrow} \quad (3.2)$$

avec $\hat{n}_{\mathbf{k},\sigma} = a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k},\sigma}$, $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t \sum_{d=1}^D \cos(k_d)$, qui sont, respectivement, l'opérateur nombre de particules du mode (\mathbf{k}, σ) et l'énergie d'une particule sur un réseau hyper-cubique de

dimension D avec un paramètre du réseau qui vaut 1. Pour un problème à N_d (nombre de sites dans la direction d) sites, la condition au limite périodique est traduite par $c_{N_d+1,\sigma} = c_{1,\sigma}$. Ceci implique que $e^{-ik_d N_d} = 1$, d'où les valeurs prises par k_d seront comme $k_d = \frac{2\pi}{N_d} n_d$. En plus, la première zone de Brillouin est définie sur le domaine où $-\pi \leq k_d < \pi$, ce qui nous donne les valeurs de n_d (n_d est un entier relatif) comme $-\frac{N_d}{2} \leq n_d < \frac{N_d}{2}$. On a alors les états possibles avec des vecteurs d'ondes suivants:

$$k_1 = 0, \quad k_2 = \frac{\pi}{3}, \quad k_3 = -\frac{\pi}{3}, \quad k_4 = \frac{2\pi}{3}, \quad k_5 = -\frac{2\pi}{3}, \quad k_6 = -\pi$$

et avec les énergies cinétiques, respectivement,

$$\epsilon_{k_1} = -2t, \quad \epsilon_{k_2} = \epsilon_{k_3} = -t, \quad \epsilon_{k_4} = \epsilon_{k_5} = t, \quad \epsilon_{k_6} = 2t.$$

Ceci nous permet d'écrire la matrice de transformation correspondante

$$\begin{pmatrix} c_{1,\sigma}^\dagger \\ c_{2,\sigma}^\dagger \\ c_{3,\sigma}^\dagger \\ c_{4,\sigma}^\dagger \\ c_{5,\sigma}^\dagger \\ c_{6,\sigma}^\dagger \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 & z & z^* & -z^* & -z & -1 \\ 1 & -z^* & -z & -z & -z^* & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -z & -z^* & -z^* & -z & 1 \\ 1 & z^* & z & -z & -z^* & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{1,\sigma}^\dagger \\ a_{2,\sigma}^\dagger \\ a_{3,\sigma}^\dagger \\ a_{4,\sigma}^\dagger \\ a_{5,\sigma}^\dagger \\ a_{6,\sigma}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (3.3)$$

avec $z = e^{i\frac{\pi}{3}}$, et la transformation inverse

$$\begin{pmatrix} a_{1,\sigma}^\dagger \\ a_{2,\sigma}^\dagger \\ a_{3,\sigma}^\dagger \\ a_{4,\sigma}^\dagger \\ a_{5,\sigma}^\dagger \\ a_{6,\sigma}^\dagger \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ z & -z^* & -1 & -z & z^* & 1 \\ z^* & -z & -1 & -z^* & z & 1 \\ -z^* & -z & 1 & -z^* & -z & 1 \\ -z & -z^* & 1 & -z & -z^* & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{1,\sigma}^\dagger \\ c_{2,\sigma}^\dagger \\ c_{3,\sigma}^\dagger \\ c_{4,\sigma}^\dagger \\ c_{5,\sigma}^\dagger \\ c_{6,\sigma}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Dans le cas demi-plein avec une projection de spin $m_s = 0$, l'état HF avec impulsion totale zéro s'écrit comme

$$|HF\rangle = a_{1,\uparrow}^\dagger a_{1,\downarrow}^\dagger a_{2,\uparrow}^\dagger a_{2,\downarrow}^\dagger a_{3,\uparrow}^\dagger a_{3,\downarrow}^\dagger |-\rangle \quad (3.5)$$

qu'on peut représenter comme sur la figure (Fig.3.1). Ainsi, l'hamiltonien transformé s'exprime comme

$$\begin{aligned} H = & -2t \sum_{\sigma} (\hat{n}_{1\sigma} - \hat{n}_{6\sigma}) - t \sum_{\sigma} (\hat{n}_{2\sigma} + \hat{n}_{3\sigma} - \hat{n}_{4\sigma} - \hat{n}_{5\sigma}) + \frac{U}{6} \sum_{i=1}^6 \hat{n}_{k_i\uparrow} \sum_{j=1}^6 \hat{n}_{k_j\downarrow} \\ & + \frac{U}{6} \left\{ [(L_{1\uparrow,2\uparrow} + L_{3\uparrow,1\uparrow}) + (L_{4\uparrow,6\uparrow} + L_{6\uparrow,5\uparrow}) + (L_{2\uparrow,4\uparrow} + L_{5\uparrow,3\uparrow})] \right\} \end{aligned}$$

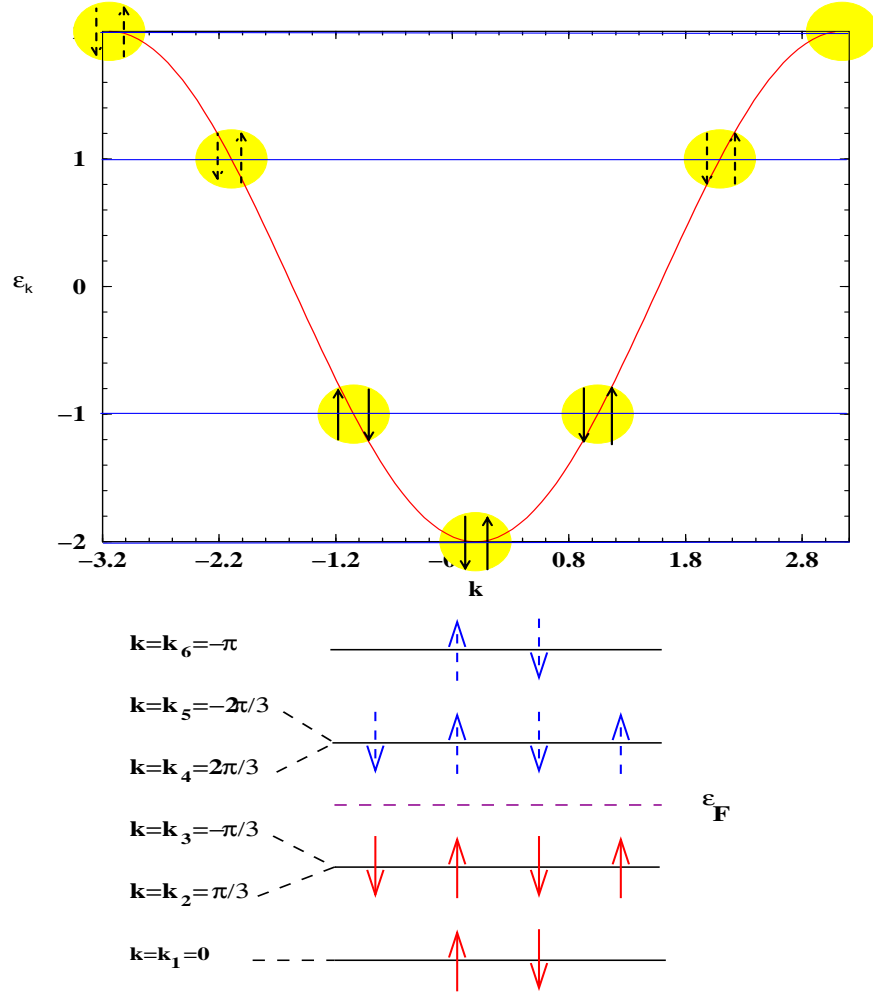


FIG. 3.1 – Spectre d'excitation HF à $U = 0$ pour la chaîne à 6-sites demi-pleine avec la projection de spin $m_s = 0$.

$$\begin{aligned}
& \cdot [(L_{2\downarrow,1\downarrow} + L_{1\downarrow,3\downarrow}) + (L_{6\downarrow,4\downarrow} + L_{5\downarrow,6\downarrow}) + (L_{4\downarrow,2\downarrow} + L_{3\downarrow,5\downarrow})] \Big\} \\
& + \left\{ [(L_{2\uparrow,3\uparrow} + L_{5\uparrow,4\uparrow}) + (L_{1\uparrow,5\uparrow} + L_{4\uparrow,1\uparrow} + L_{3\uparrow,6\uparrow} + L_{6\uparrow,2\uparrow})] \right. \\
& \quad \cdot [(L_{3\downarrow,2\downarrow} + L_{4\downarrow,5\downarrow}) + (L_{5\downarrow,1\downarrow} + L_{1\downarrow,4\downarrow} + L_{6\downarrow,3\downarrow} + L_{2\downarrow,6\downarrow})] \Big\} + cc \Big\} \\
& + \frac{U}{6} [(L_{1\uparrow,6\uparrow} + L_{2\uparrow,5\uparrow} + L_{3\uparrow,4\uparrow}) + cc] [(L_{1\downarrow,6\downarrow} + L_{2\downarrow,5\downarrow} + L_{3\downarrow,4\downarrow}) + cc] , \quad (3.6)
\end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned}
L_{k\sigma,k'\sigma} &= a_{k\sigma}^\dagger a_{k'\sigma} , & k \neq k' \\
\hat{n}_{k\sigma} &= a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} .
\end{aligned} \quad (3.7)$$

En calculant les moments de transfert pour un spin donné $q_{ph} = k_p - k_h$ ($-\pi \leq q_{ph} < \pi$) associés aux excitations particule-trou ($p - h$) pour la chaîne à six sites avec h l'indice de trou ($\epsilon_k \leq \epsilon_F$) et p l'indice de particule ($\epsilon_k > \epsilon_F$). Dans le cas demi-plein, on obtient les valeurs suivantes pour q_{ph}

$ q = \frac{2\pi}{3}$	$ q = \pi$	$ q = \frac{\pi}{3}$
$51 \rightarrow q_{51} = -\frac{2\pi}{3}$	$61 \rightarrow q_{61} = -\pi$	$42 \rightarrow q_{42} = +\frac{\pi}{3}$
$41 \rightarrow q_{41} = +\frac{2\pi}{3}$	$52 \rightarrow q_{52} = -\pi$	$53 \rightarrow q_{53} = -\frac{\pi}{3}$
$62 \rightarrow q_{62} = +\frac{2\pi}{3}$	$43 \rightarrow q_{43} = +\pi$	
$63 \rightarrow q_{63} = -\frac{2\pi}{3}$		

3.1 Hamiltonien de quasiparticules

La transformation (3.3) reste inchangée tant qu'on est dans la région "sphérique" c'est à dire invariante par translation. On veut étudier ici le modèle dans cette phase. Pour cela, on définit les opérateurs $b_{k,\sigma}$ de telle sorte que l'action d'un destructeur sur l'état HF donne zéro,

$$a_{h,\sigma} = b_{h,\sigma}^\dagger, \quad a_{p,\sigma} = b_{p,\sigma} \quad \implies \quad b_{k,\sigma}|HF\rangle = 0 \quad \text{pour tout } k \quad (3.8)$$

Ainsi, l'hamiltonien en ordre normal des b^\dagger , b est donné par

$$H = H_{HF} + H_{|q|=0} + H_{|q|=\frac{\pi}{3}} + H_{|q|=\frac{2\pi}{3}} + H_{|q|=\pi} \quad (3.9)$$

$$\begin{aligned}
H_{HF} &= E_{HF} + \sum_{\sigma} (\epsilon_4 \tilde{n}_{4,\sigma} + \epsilon_5 \tilde{n}_{5,\sigma} + \epsilon_6 \tilde{n}_{6,\sigma} - \epsilon_1 \tilde{n}_{1,\sigma} - \epsilon_2 \tilde{n}_{2,\sigma} - \epsilon_3 \tilde{n}_{3,\sigma}) \\
H_{|q|=0} &= G \sum_{i=1}^3 (\tilde{n}_{p_i,\uparrow} - \tilde{n}_{h_i,\uparrow}) \sum_{j=1}^3 (\tilde{n}_{p_j,\downarrow} - \tilde{n}_{h_j,\downarrow}), \\
H_{|q|=\frac{\pi}{3}} &= G \left\{ \left[(S_{4\uparrow,6\uparrow}^- + S_{6\uparrow,5\uparrow}^+) - (S_{2\uparrow,1\uparrow}^+ + S_{1\uparrow,3\uparrow}^-) + (J_{2\uparrow,4\uparrow}^- + J_{5\uparrow,3\uparrow}^+) \right] \right. \\
&\quad \cdot \left[(S_{6\downarrow,4\downarrow}^+ + S_{5\downarrow,6\downarrow}^-) - (S_{1\downarrow,2\downarrow}^- + S_{1\downarrow,3\downarrow}^-) + (J_{4\downarrow,2\downarrow}^+ + J_{3\downarrow,5\downarrow}^-) \right] \Big\} + cc \\
H_{|q|=\frac{2\pi}{3}} &= G \left\{ \left[(S_{5\uparrow,4\uparrow}^+ - S_{3\uparrow,2\uparrow}^+) + (J_{1\uparrow,5\uparrow}^- + J_{4\uparrow,1\uparrow}^+ + J_{3\uparrow,6\uparrow}^- + J_{6\uparrow,2\uparrow}^+) \right] \right. \\
&\quad \cdot \left[(S_{4\downarrow,5\downarrow}^- - S_{2\downarrow,3\downarrow}^-) + (J_{5\downarrow,1\downarrow}^+ + J_{1\downarrow,4\downarrow}^- + J_{6\downarrow,3\downarrow}^+ + J_{2\downarrow,6\downarrow}^-) \right] \Big\} + cc \\
H_{|q|=\pi} &= G \left[(J_{1\uparrow,6\uparrow}^- + J_{2\uparrow,5\uparrow}^- + J_{3\uparrow,4\uparrow}^-) + cc \right] \left[(J_{1\downarrow,6\downarrow}^- + J_{2\downarrow,5\downarrow}^- + J_{3\downarrow,4\downarrow}^-) + cc \right], \quad (3.10)
\end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned}
E_{HF} &\equiv \langle HF|H|HF\rangle = -8t + \frac{3}{4}U, \\
\epsilon_1 &= -2t + \frac{U}{2}, & \epsilon_2 = \epsilon_3 = -t + \frac{U}{2}, \\
\epsilon_4 &= \epsilon_5 = t + \frac{U}{2}, & \epsilon_6 = -2t + \frac{U}{2}, \\
G &= \frac{U}{6},
\end{aligned} \tag{3.11}$$

$\tilde{n}_{k,\sigma} = b_{k,\sigma}^\dagger b_{k,\sigma}$ nombre d'occupation de quasiparticules du mode (k, σ) ,

$J_{ph,\sigma}^- = b_{h,\sigma} b_{p,\sigma}$ opérateur d'annihilation d'une paire de quasiparticules ph de spin σ ,

$J_{ph,\sigma}^+ = b_{p,\sigma}^\dagger b_{h,\sigma}^\dagger$ opérateur de création d'une paire de quasiparticules ph de spin σ .

$S_{ll',\sigma}^+ = b_{l,\sigma}^\dagger b_{l',\sigma}$ avec $l > l'$ opérateur d'excitation avec deux indices soit de particule, soit de trou.

$$S_{l'l,\sigma}^- = \left(S_{ll',\sigma}^+ \right)^\dagger$$

On voit que l'hamiltonien à 6-sites a, en grande partie, la même structure ($H_{HF} + H_{|q|=0} + H_{|q|=\pi}$) que celui à deux sites. Il est augmenté uniquement par des termes $S_{ll',\sigma}^\pm$ dans ($H_{|q|=\frac{\pi}{3}} + H_{|q|=\frac{2\pi}{3}}$), c'est à dire par des termes bilinéaires, soit avec deux indices de trous, soit avec deux indices de particules.

3.2 Réponse de charge et spin longitudinal

Par analogie avec le cas à deux sites, les composantes ph de l'opérateur d'excitation sont définies de telles sorte que les états p et h ont le même spin. En général, pour chaque canal (relativement à la valeur absolue du vecteur d'onde de transfert, $|q|$), on définit l'opérateur d'excitation ph -RPA

$$Q_\nu^\dagger = \sum_i \frac{1}{\sqrt{1 - \langle M_i \rangle}} \left(\mathcal{X}_i^\nu J_i^+ - \mathcal{Y}_i^\nu J_i^- \right) \tag{3.12}$$

avec toujours la même condition,

$$Q_\nu |0\rangle = 0 \quad \text{et} \quad |\nu\rangle = Q_\nu^\dagger |0\rangle \tag{3.13}$$

où, en notant les indices $\{p, h \text{ et } \sigma\}$ par un seul indice $\{i\}$, les opérateurs de densités sont donnés par

$$\begin{aligned} M_i &\equiv M_{ph,\sigma} = \tilde{n}_{h\sigma} + \tilde{n}_{p\sigma} , \\ J_i^0 &\equiv J_{ph,\sigma}^0 = \frac{1}{2} (M_i - 1) , \\ \hat{N}_i &\equiv \hat{N}_{ph,\sigma} = 1 + \tilde{n}_{p\sigma} - \tilde{n}_{h\sigma} . \end{aligned} \quad (3.14)$$

Les relations de commutations entre les opérateurs définis en (3.12) sont

$$\begin{aligned} [J_i^-, J_{i'}^+] &= -2 J_i^0 \delta_{ii'} , \\ [J_i^0, J_{i'}^\pm] &= \pm \delta_{ii'} J_i^\pm , \\ [\hat{N}_i, J_{i'}^\pm] &= [\hat{N}_i, J_{i'}^0] = 0 . \end{aligned} \quad (3.15)$$

C'est donc à nouveau une algèbre $SU2$. L'équation SCRPA est, comme auparavant, donnée par

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A} & \mathcal{B} \\ -\mathcal{B} & -\mathcal{A} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{X} \\ \mathcal{Y} \end{pmatrix} = \mathcal{E} \begin{pmatrix} \mathcal{X} \\ \mathcal{Y} \end{pmatrix}$$

avec les éléments de matrice,

$$\mathcal{A}_{i,i'} = \frac{\langle [J_{i'}^- [H, J_i^+]] \rangle}{\sqrt{(1 - \langle M_{i'} \rangle)(1 - \langle M_i \rangle)}} , \quad \mathcal{B}_{i,i'} = -\frac{\langle [J_{i'}^- [H, J_i^-]] \rangle}{\sqrt{(1 - \langle M_{i'} \rangle)(1 - \langle M_i \rangle)}} . \quad (3.16)$$

Pour le calcul de \mathcal{A} et \mathcal{B} , on utilise les relations d'orthogonalisation et de fermeture

$$\begin{aligned} \sum_i (\mathcal{X}_i^\nu \mathcal{X}_i^{\nu'} - \mathcal{Y}_i^\nu \mathcal{Y}_i^{\nu'}) &= \delta_{\nu\nu'} , & \sum_i (\mathcal{X}_i^\nu \mathcal{Y}_i^{\nu'} - \mathcal{Y}_i^\nu \mathcal{X}_i^{\nu'}) &= 0 , \\ \sum_\nu (\mathcal{X}_i^\nu \mathcal{X}_{i'}^\nu - \mathcal{Y}_i^\nu \mathcal{Y}_{i'}^\nu) &= \delta_{ii'} , & \sum_\nu (\mathcal{X}_i^\nu \mathcal{X}_{i'}^\nu - \mathcal{Y}_i^\nu \mathcal{Y}_{i'}^\nu) &= 0 \end{aligned} \quad (3.17)$$

ce qui nous permet d'inverser l'équation (3.12)

$$\begin{aligned} J_i^- &= \sqrt{1 - \langle M_i \rangle} \sum_\nu (\mathcal{X}_i^\nu Q_\nu + \mathcal{Y}_i^\nu Q_\nu^\dagger) \\ J_i^+ &= \sqrt{1 - \langle M_i \rangle} \sum_\nu (\mathcal{Y}_i^\nu Q_\nu + \mathcal{X}_i^\nu Q_\nu^\dagger) . \end{aligned} \quad (3.18)$$

Ainsi, avec (3.13) on peut calculer les valeurs moyennes dans l'état RPA des produits d'opérateurs suivants

$$\langle J_{i'}^+ J_i^- \rangle = \sqrt{(1 - \langle M_{i'} \rangle)(1 - \langle M_i \rangle)} \sum_\nu \mathcal{Y}_{i'}^\nu \mathcal{Y}_i^\nu ,$$

$$\begin{aligned}
\langle J_{i'}^- J_i^+ \rangle &= \sqrt{(1 - \langle M_{i'} \rangle)(1 - \langle M_i \rangle)} \sum_{\nu} \mathcal{X}_{i'}^{\nu} \mathcal{X}_i^{\nu}, \\
\langle J_{i'}^+ J_i^+ \rangle &= \sqrt{(1 - \langle M_{i'} \rangle)(1 - \langle M_i \rangle)} \sum_{\nu} \mathcal{Y}_{i'}^{\nu} \mathcal{X}_i^{\nu}, \\
\langle J_{i'}^- J_i^- \rangle &= \sqrt{(1 - \langle M_{i'} \rangle)(1 - \langle M_i \rangle)} \sum_{\nu} \mathcal{X}_{i'}^{\nu} \mathcal{Y}_i^{\nu}.
\end{aligned} \tag{3.19}$$

En plus, on a pour une algèbre $SU2$ et pour des particules de spin- $\frac{1}{2}$, la relation de Casimir

$$\frac{1}{2} (J_i^- J_i^+ + J_i^+ J_i^-) + (J_i^0)^2 = (\mathbf{J}_i)^2 \tag{3.20}$$

ce qui nous donne

$$J_i^- J_i^+ + J_i^+ J_i^- = 1 \tag{3.21}$$

car $(J_i^0)^2 = \frac{1}{4}$ et $(\mathbf{J}_i)^2 = \frac{3}{4}$. Ceci nous permet d'exprimer les quantités $\langle M_i \rangle$ par les amplitudes RPA

$$\begin{aligned}
M_i &= 2 J_i^+ J_i^- \\
\langle M_i \rangle &= \frac{2 \sum_{\nu} (\mathcal{Y}_i^{\nu})^2}{1 + 2 \sum_{\nu} (\mathcal{Y}_i^{\nu})^2}
\end{aligned} \tag{3.22}$$

ce qui est formellement la même relation qu'en (2.31). Dans le but de fermer le système d'équations SCRPA, on doit aussi exprimer les fonctions de corrélations de type $\langle M_i M_j \rangle$ en fonction des amplitudes RPA. Tout d'abord, on a une relation exacte si $i = j$

$$M_i M_i = 2 M_i, \tag{3.23}$$

ce qui nous donne directement la relation

$$\langle M_i M_i \rangle = 2 \langle M_i \rangle. \tag{3.24}$$

Avec (3.22) on a également

$$M_i M_j = 4 J_i^+ J_j^- J_j^+ J_i^- \quad \text{pour } i \neq j, \tag{3.25}$$

ce qui donne pour $i \neq j$

$$\langle M_i M_j \rangle = 4(1 - \langle M_i \rangle)(1 - \langle M_j \rangle) \sum_{\nu_0 \nu_3} \sum_{\nu_1 \nu_2} Y_i^{\nu_0} Y_i^{\nu_3} X_j^{\nu_1} X_j^{\nu_2} \langle Q_{\nu_0} Q_{\nu_1} Q_{\nu_2}^{\dagger} Q_{\nu_3}^{\dagger} \rangle. \tag{3.26}$$

Pour le calcul de la fonction de corrélation $\langle Q_{\nu_0} Q_{\nu_1} Q_{\nu_2}^{\dagger} Q_{\nu_3}^{\dagger} \rangle$, nous commutons les Q_{ν} vers la droite et en utilisant la condition (3.13), on obtient un système d'équations pour les $\langle M_i M_j \rangle$ qu'on peut résoudre. On donne le détail de ce calcul dans l'annexe (A.1). Il nous reste encore à évaluer les valeurs moyennes de densités de type $\tilde{n}_{k,\sigma}$ et $\tilde{n}_{k,\uparrow} \tilde{n}_{k,\downarrow}$ pour calculer la valeur moyenne de H . Ceci fait l'objet du paragraphe suivant.

3.2.1 Calculs de $\langle \tilde{n}_{k_i\sigma} \rangle$ et $\langle \tilde{n}_{k_i\uparrow} \tilde{n}_{k_j\downarrow} \rangle$

Etant donné que le présent formalisme RPA conserve le nombre de particules par spin- σ (du fait que la transformation HF (3.3) ne brise pas la symétrie de spin), on a

$$\hat{N}_\sigma = N_\sigma + \sum_p \tilde{n}_{p\sigma} - \sum_h \tilde{n}_{h\sigma} \quad (3.27)$$

et la valeur moyenne $\langle \hat{N}_\sigma \rangle = N_\sigma = \frac{N}{2}$ ce qui nous donne

$$\sum_p \langle \tilde{n}_{p\sigma} \rangle = \sum_h \langle \tilde{n}_{h\sigma} \rangle \quad (3.28)$$

Dans le canal $m_s = 0$ et pour un système demi-plein (3 électrons de spin- \uparrow et 3 électrons de spin- \downarrow), on a $N_\sigma = 3$ et (3.28) donne

$$\langle \tilde{n}_{6\sigma} \rangle + \langle \tilde{n}_{5\sigma} \rangle + \langle \tilde{n}_{4\sigma} \rangle = \langle \tilde{n}_{3\sigma} \rangle + \langle \tilde{n}_{2\sigma} \rangle + \langle \tilde{n}_{1\sigma} \rangle . \quad (3.29)$$

On exprime les $\tilde{n}_{i\sigma}$ en fonction des $M_{ph\sigma}$ qui sont données par l'équation (3.22). En effet, on a

$$M_{ph\sigma} = \tilde{n}_{p\sigma} + \tilde{n}_{h\sigma} \quad (3.30)$$

pour chaque couple (p, h) , on obtient ainsi,

$$\langle \tilde{n}_{6\sigma} \rangle = \frac{1}{18} \langle \{ 5(M_{61\sigma} + M_{62\sigma} + M_{63\sigma}) - (M_{51\sigma} + M_{52\sigma} + M_{53\sigma}) - (M_{41\sigma} + M_{42\sigma} + M_{43\sigma}) \} \rangle$$

$$\langle \tilde{n}_{5\sigma} \rangle = \frac{1}{18} \langle \{ -(M_{61\sigma} + M_{62\sigma} + M_{63\sigma}) + 5(M_{51\sigma} + M_{52\sigma} + M_{53\sigma}) - (M_{41\sigma} + M_{42\sigma} + M_{43\sigma}) \} \rangle$$

$$\langle \tilde{n}_{4\sigma} \rangle = \frac{1}{18} \langle \{ -(M_{61\sigma} + M_{62\sigma} + M_{63\sigma}) - (M_{51\sigma} + M_{52\sigma} + M_{53\sigma}) + 5(M_{41\sigma} + M_{42\sigma} + M_{43\sigma}) \} \rangle$$

$$\langle \tilde{n}_{3\sigma} \rangle = \langle M_{63\sigma} \rangle - \langle \tilde{n}_{6\sigma} \rangle , \quad \langle \tilde{n}_{2\sigma} \rangle = \langle M_{62\sigma} \rangle - \langle \tilde{n}_{6\sigma} \rangle , \quad \langle \tilde{n}_{1\sigma} \rangle = \langle M_{61\sigma} \rangle - \langle \tilde{n}_{6\sigma} \rangle \quad (3.31)$$

D'autre part, on a également

$$\hat{N}_\sigma \hat{N}_{\sigma'} = (N_\sigma + \sum_p \tilde{n}_{p\sigma} - \sum_h \tilde{n}_{h\sigma})(N_{\sigma'} + \sum_{p'} \tilde{n}_{p'\sigma'} - \sum_{h'} \tilde{n}_{h'\sigma'}) \quad (3.32)$$

avec la valeur moyenne $\langle \hat{N}_\sigma \hat{N}_{\sigma'} \rangle = N_\sigma + N_{\sigma'}$, ce qui nous donne

$$\begin{aligned} \langle (\sum_p \tilde{n}_{p\sigma} - \sum_h \tilde{n}_{h\sigma})(\sum_{p'} \tilde{n}_{p'\sigma'} - \sum_{h'} \tilde{n}_{h'\sigma'}) \rangle &= N_{\sigma'} \langle (\sum_p \tilde{n}_{p\sigma} - \sum_h \tilde{n}_{h\sigma}) \rangle \\ &\quad + N_\sigma \langle (\sum_{p'} \tilde{n}_{p'\sigma'} - \sum_{h'} \tilde{n}_{h'\sigma'}) \rangle \end{aligned} \quad (3.33)$$

Ainsi pour notre cas, on a la relation

$$\begin{aligned} \langle (\sum_p \tilde{n}_{p\uparrow} - \sum_h \tilde{n}_{h\uparrow})(\sum_{p'} \tilde{n}_{p'\downarrow} - \sum_{h'} \tilde{n}_{h'\downarrow}) \rangle &= 3 \langle (\sum_{p\sigma} \tilde{n}_{p\sigma} - \sum_{h\sigma} \tilde{n}_{h\sigma}) \rangle \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3.34)$$

ce qui nous permet de calculer la valeur moyenne de H (3.10),

$$E_{SCRPA} = \langle H \rangle = \langle H_{HF} \rangle + \langle H_{|q|=0} \rangle + \langle H_{|q|=\frac{\pi}{3}} \rangle + \langle H_{|q|=\frac{2\pi}{3}} \rangle + \langle H_{|q|=\pi} \rangle \quad (3.35)$$

avec

$$\begin{aligned} \langle H_{HF} \rangle &= E_{HF} + \sum_{\sigma} (\epsilon_4 \langle \tilde{n}_{4,\sigma} \rangle + \epsilon_5 \langle \tilde{n}_{5,\sigma} \rangle + \epsilon_6 \langle \tilde{n}_{6,\sigma} \rangle - \epsilon_1 \langle \tilde{n}_{1,\sigma} \rangle - \epsilon_2 \langle \tilde{n}_{2,\sigma} \rangle - \epsilon_3 \langle \tilde{n}_{3,\sigma} \rangle) \\ \langle H_{|q|=\frac{\pi}{3}} \rangle &= G \langle \left\{ \left(J_{2\uparrow,4\uparrow}^- + J_{5\uparrow,3\uparrow}^+ \right) \left(J_{4\downarrow,2\downarrow}^+ + J_{3\downarrow,5\downarrow}^- \right) \right\} + cc \rangle \\ \langle H_{|q|=\frac{2\pi}{3}} \rangle &= G \langle \left\{ \left(J_{1\uparrow,5\uparrow}^- + J_{4\uparrow,1\uparrow}^+ + J_{3\uparrow,6\uparrow}^- + J_{6\uparrow,2\uparrow}^+ \right) \left(J_{5\downarrow,1\downarrow}^+ + J_{1\downarrow,4\downarrow}^- + J_{6\downarrow,3\downarrow}^+ + J_{2\downarrow,6\downarrow}^- \right) \right\} \\ &\quad + cc \rangle \\ \langle H_{|q|=\pi} \rangle &= G \langle \left[\left(J_{1\uparrow,6\uparrow}^- + J_{2\uparrow,5\uparrow}^- + J_{3\uparrow,4\uparrow}^- \right) + cc \right] \left[\left(J_{1\downarrow,6\downarrow}^- + J_{2\downarrow,5\downarrow}^- + J_{3\downarrow,4\downarrow}^- \right) + cc \right] \rangle. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Avec la conservation du nombre de particules (3.29) et (3.34), on a $\langle H_{|q|=0} \rangle = 0$ (comme pour le cas à deux sites). Nous avons ici négligé des valeurs moyennes de types $\langle S J \rangle$ et $\langle S S \rangle$. Nous allons discuter dans le paragraphe (3.2.3) les raisons pour les quelles nous ne considérons pas ces termes. Nous allons voir que c'est essentiellement à cause de leur très faible importance.

3.2.2 ph -RPA standard

Dans la RPA standard, on calcule la valeur moyenne de chaque élément de matrice dans l'état HF. Ainsi les différentes valeurs moyennes des termes qui apparaissent dans ces calculs sont données par

$$\langle J_{ph,\uparrow}^{\pm} J_{p'h',\downarrow}^{\pm} \rangle = 0 \quad \langle M_{ph,\sigma} \rangle = 0 \quad \langle M_{ph,\uparrow} M_{p'h',\downarrow} \rangle = 0. \quad (3.37)$$

Ajoutons que la valeur absolue du vecteur d'onde de transfert est un bon nombre quantique et que le système d'équations globale se découple en des sous-systèmes pour chaque valeur de $|q|$. Nous calculons les éléments de matrice \mathcal{A} et \mathcal{B} pour chaque transfert afin de déterminer les énergies d'excitation ph -RPA standard et l'énergie fondamentale du système. Nous allons discuter la séparation en excitations de charge et de spin plus loin.

Pour $|q_1| = \frac{2\pi}{3}$:

On définit l'opérateur d'excitation ph -RPA pour $+q_1$ par

$$\begin{aligned} Q_{q_1, \nu}^\dagger = & \mathcal{X}_{1\uparrow, 5\uparrow}^\nu K_{5\uparrow, 1\uparrow}^+ + \mathcal{X}_{1\downarrow, 5\downarrow}^\nu K_{5\downarrow, 1\downarrow}^+ + \mathcal{X}_{3\downarrow, 6\downarrow}^\nu K_{6\downarrow, 3\downarrow}^+ + \mathcal{X}_{3\uparrow, 6\uparrow}^\nu K_{6\uparrow, 3\uparrow}^+ \\ & - \mathcal{Y}_{1\uparrow, 5\uparrow}^\nu K_{1\uparrow, 5\uparrow}^- - \mathcal{Y}_{1\downarrow, 5\downarrow}^\nu K_{1\downarrow, 5\downarrow}^- - \mathcal{Y}_{3\downarrow, 6\downarrow}^\nu K_{3\downarrow, 6\downarrow}^- - \mathcal{Y}_{3\uparrow, 6\uparrow}^\nu K_{3\uparrow, 6\uparrow}^- \end{aligned} \quad (3.38)$$

avec

$$K_{i\sigma, j\sigma}^\pm = \frac{J_{i\sigma, j\sigma}^\pm}{\sqrt{1 - M_{ij\sigma}}}$$

et l'opérateur d'excitation ph -RPA pour $-q_1$ par

$$\begin{aligned} Q_{-q_1, \nu}^\dagger = & \mathcal{X}_{1\uparrow, 4\uparrow}^\nu K_{4\uparrow, 1\uparrow}^+ + \mathcal{X}_{1\downarrow, 4\downarrow}^\nu K_{4\downarrow, 1\downarrow}^+ + \mathcal{X}_{2\downarrow, 6\downarrow}^\nu K_{6\downarrow, 2\downarrow}^+ + \mathcal{X}_{2\uparrow, 6\uparrow}^\nu K_{6\uparrow, 2\uparrow}^+ \\ & - \mathcal{Y}_{1\uparrow, 4\uparrow}^\nu K_{1\uparrow, 4\uparrow}^- - \mathcal{Y}_{1\downarrow, 4\downarrow}^\nu K_{1\downarrow, 4\downarrow}^- - \mathcal{Y}_{2\downarrow, 6\downarrow}^\nu K_{2\downarrow, 6\downarrow}^- - \mathcal{Y}_{2\uparrow, 6\uparrow}^\nu K_{2\uparrow, 6\uparrow}^- \end{aligned} \quad (3.39)$$

Ceci nous amène à considérer dans ce canal $|q| = \frac{2\pi}{3}$, l'opérateur d'excitation globale suivant

$$Q_{1, \nu}^\dagger = Q_{+q_1, \nu}^\dagger + Q_{-q_1, \nu}^\dagger \quad (3.40)$$

Ainsi, nous calculons la matrice \mathcal{A} ,

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} \mathcal{A}_{+q_1} & 0 \\ 0 & \mathcal{A}_{-q_1} \end{pmatrix} \quad (3.41)$$

avec

$$\mathcal{A}_{+q_1} = \mathcal{A}_{-q_1} = \begin{pmatrix} 3t & G & G & 0 \\ G & 3t & 0 & G \\ G & 0 & 3t & G \\ 0 & G & G & 3t \end{pmatrix} \quad (3.42)$$

on remarque que les deux canaux ($+q_1$ et $-q_1$) sont découplés. Par contre, pour la matrice \mathcal{B} ,

$$\mathcal{B} = \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{B}_{\pm q_1} \\ \mathcal{B}_{\pm q_1} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.43)$$

ils sont couplés par la matrice $\mathcal{B}_{\pm q_1}$ qui est donnée par

$$\mathcal{B}_{\pm q_1} = \begin{pmatrix} 0 & G & G & 0 \\ G & 0 & 0 & G \\ G & 0 & 0 & G \\ 0 & G & G & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.44)$$

Ceci nous donne les deux valeurs propres doublement dégénérées,

$$\mathcal{E}_1 = 3t\sqrt{1 - \frac{2U}{9t}}, \quad \mathcal{E}_3 = 3t\sqrt{1 + \frac{2U}{9t}}, \quad (3.45)$$

et une valeur 4-fois dégénérée

$$\mathcal{E}_2 = 3t. \quad (3.46)$$

On remarque que la valeur propre \mathcal{E}_1 tend vers zéro lorsque U tend vers $\frac{9t}{2}$ et au delà elle devient imaginaire pure. Ceci montre qu'il y a un point de transition de phase pour $U_c = \frac{9t}{2}$ (voir Fig. 3.4). Nous constatons que toutes les valeurs propres de la matrice RPA sont au moins doublement dégénérées. Ceci nous ramène à considérer l'opérateur d'excitation dans ce canal comme

$$\begin{aligned} Q_{|q_1|,\nu}^\dagger = & \mathcal{X}_{1\uparrow,5\uparrow}^\nu K_{5\uparrow,1\uparrow}^+ + \mathcal{X}_{1\downarrow,5\downarrow}^\nu K_{5\downarrow,1\downarrow}^+ + \mathcal{X}_{3\downarrow,6\downarrow}^\nu K_{6\downarrow,3\downarrow}^+ + \mathcal{X}_{3\uparrow,6\uparrow}^\nu K_{6\uparrow,3\uparrow}^+ \\ & - \mathcal{Y}_{1\uparrow,4\uparrow}^\nu K_{1\uparrow,4\uparrow}^- - \mathcal{Y}_{1\downarrow,4\downarrow}^\nu K_{1\downarrow,4\downarrow}^- - \mathcal{Y}_{2\downarrow,6\downarrow}^\nu K_{2\downarrow,6\downarrow}^- - \mathcal{Y}_{2\uparrow,6\uparrow}^\nu K_{2\uparrow,6\uparrow}^- \end{aligned} \quad (3.47)$$

ou

$$\begin{aligned} Q_{|q_1|,\nu}^\dagger = & \mathcal{X}_{1\uparrow,4\uparrow}^\nu K_{4\uparrow,1\uparrow}^+ + \mathcal{X}_{1\downarrow,4\downarrow}^\nu K_{4\downarrow,1\downarrow}^+ + \mathcal{X}_{2\downarrow,6\downarrow}^\nu K_{6\downarrow,2\downarrow}^+ + \mathcal{X}_{2\uparrow,6\uparrow}^\nu K_{6\uparrow,2\uparrow}^+ \\ & - \mathcal{Y}_{1\uparrow,5\uparrow}^\nu K_{1\uparrow,5\uparrow}^- - \mathcal{Y}_{1\downarrow,5\downarrow}^\nu K_{1\downarrow,5\downarrow}^- - \mathcal{Y}_{3\downarrow,6\downarrow}^\nu K_{3\downarrow,6\downarrow}^- - \mathcal{Y}_{3\uparrow,6\uparrow}^\nu K_{3\uparrow,6\uparrow}^- \end{aligned} \quad (3.48)$$

qui nous donne les deux matrice RPA (4×4) sous la forme

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}_{+q_1} = \mathcal{A}_{-q_1} \quad \mathcal{B} = \mathcal{B}_{\pm q_1} \quad (3.49)$$

et l'équation RPA nous donne les mêmes valeurs propres.

Pour $q_2 = \pi$:

Remarquons dans ce canal que les transferts $\pm\pi$ sont équivalents. Ainsi, l'opérateur d'excitation ph -RPA dans ce canal est donné par

$$\begin{aligned} Q_{q_2,\nu}^\dagger = & \mathcal{X}_{1\uparrow,6\uparrow}^\nu K_{6\uparrow,1\uparrow}^+ + \mathcal{X}_{1\downarrow,6\downarrow}^\nu K_{6\downarrow,1\downarrow}^+ + \mathcal{X}_{2\uparrow,5\uparrow}^\nu K_{5\uparrow,2\uparrow}^+ \\ & + \mathcal{X}_{2\downarrow,5\downarrow}^\nu K_{5\downarrow,2\downarrow}^+ + \mathcal{X}_{3\uparrow,4\uparrow}^\nu K_{4\uparrow,3\uparrow}^+ + \mathcal{X}_{3\downarrow,4\downarrow}^\nu K_{4\downarrow,3\downarrow}^+ \\ & - \mathcal{Y}_{1\uparrow,6\uparrow}^\nu K_{1\uparrow,6\uparrow}^- - \mathcal{Y}_{1\downarrow,6\downarrow}^\nu K_{1\downarrow,6\downarrow}^- - \mathcal{Y}_{2\uparrow,5\uparrow}^\nu K_{2\uparrow,5\uparrow}^- \\ & - \mathcal{Y}_{2\downarrow,5\downarrow}^\nu K_{2\downarrow,5\downarrow}^- - \mathcal{Y}_{3\uparrow,4\uparrow}^\nu K_{3\uparrow,4\uparrow}^- - \mathcal{Y}_{3\downarrow,4\downarrow}^\nu K_{3\downarrow,4\downarrow}^- \end{aligned} \quad (3.50)$$

ce qui nous permet de calculer la matrice \mathcal{A} qui est une matrice (6×6) et qui s'écrit comme

$$\mathcal{A}_{q_2} = \begin{pmatrix} 4t & G & 0 & G & 0 & G \\ G & 4t & G & 0 & G & 0 \\ 0 & G & 2t & G & 0 & G \\ G & 0 & G & 2t & G & 0 \\ 0 & G & 0 & G & 2t & G \\ G & 0 & G & 0 & G & 2t \end{pmatrix} \quad (3.51)$$

De même, la matrice \mathcal{B}_2 s'écrit comme

$$\mathcal{B}_{q_2} = \begin{pmatrix} 0 & G & 0 & G & 0 & G \\ G & 0 & G & 0 & G & 0 \\ 0 & G & 0 & G & 0 & G \\ G & 0 & G & 0 & G & 0 \\ 0 & G & 0 & G & 0 & G \\ G & 0 & G & 0 & G & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.52)$$

Ceci nous donne les valeurs propres suivantes:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_4 &= t \sqrt{10 - 8\frac{G}{t} - 2\sqrt{9 + 16(\frac{G}{t})^2}}, & \mathcal{E}_5 &= t \sqrt{10 + 8\frac{G}{t} - 2\sqrt{9 + 16(\frac{G}{t})^2}}, \\ \mathcal{E}_7 &= t \sqrt{10 - 8\frac{G}{t} + 2\sqrt{9 + 16(\frac{G}{t})^2}}, & \mathcal{E}_8 &= t \sqrt{10 + 8\frac{G}{t} + 2\sqrt{9 + 16(\frac{G}{t})^2}}, \end{aligned} \quad (3.53)$$

et la valeur 2-fois dégénérée

$$\mathcal{E}_6 = 4t. \quad (3.54)$$

On remarque aussi qu'il y a un point de transition de phase pour $U_c = \frac{12t}{5}$ (voir Fig. 3.3).

Pour $|q_3| = \frac{\pi}{3}$:

L'opérateur d'excitation est donné par

$$Q_{3,\nu}^\dagger = Q_{+q_3,\nu}^\dagger + Q_{-q_3,\nu}^\dagger \quad (3.55)$$

avec

$$\begin{aligned} Q_{+q_3,\nu}^\dagger &= \mathcal{X}_{2\uparrow,4\uparrow}^\nu K_{4\uparrow,2\uparrow}^+ + \mathcal{X}_{2\downarrow,4\downarrow}^\nu K_{4\downarrow,2\downarrow}^+ \\ &\quad - \mathcal{Y}_{2\uparrow,4\uparrow}^\nu K_{2\uparrow,4\uparrow}^- - \mathcal{Y}_{2\downarrow,4\downarrow}^\nu K_{2\downarrow,4\downarrow}^- \end{aligned} \quad (3.56)$$

et

$$Q_{-q_3, \nu}^{\dagger} = \mathcal{X}_{3\uparrow, 5\uparrow}^{\nu} K_{5\uparrow, 3\uparrow}^{+} + \mathcal{X}_{3\downarrow, 5\downarrow}^{\nu} K_{5\downarrow, 3\downarrow}^{+} - \mathcal{Y}_{3\uparrow, 5\uparrow}^{\nu} K_{5\uparrow, 3\uparrow}^{-} - \mathcal{Y}_{3\downarrow, 5\downarrow}^{\nu} K_{5\downarrow, 3\downarrow}^{-} . \quad (3.57)$$

Ceci nous donne la matrice \mathcal{A} comme

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} \mathcal{A}_{+q_3} & 0 \\ 0 & \mathcal{A}_{-q_3} \end{pmatrix} \quad (3.58)$$

avec

$$\mathcal{A}_{+q_3} = \mathcal{A}_{-q_3} = \begin{pmatrix} 2t & G \\ G & 2t \end{pmatrix} \quad (3.59)$$

et la matrice \mathcal{B} s'écrit comme

$$\mathcal{B} = \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{B}_{\pm q_3} \\ \mathcal{B}_{\pm q_3} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.60)$$

avec la matrice $\mathcal{B}_{\pm q_3}$ qui s'écrit comme

$$\mathcal{B}_{\pm q_3} = \begin{pmatrix} 0 & G \\ G & 0 \end{pmatrix} . \quad (3.61)$$

Ceci donne les deux valeurs propres doublement dégénérées,

$$\mathcal{E}_7 = 2t\sqrt{1 - \frac{U}{6t}} , \quad \mathcal{E}_8 = 2t\sqrt{1 + \frac{U}{6t}} . \quad (3.62)$$

On remarque qu'il y a un point de transition de phase pour $U_c = 6t$ (voir Fig. 3.5). De même, par rapport au canal $|q_1| = \frac{2\pi}{3}$, on peut restreindre l'opérateur d'excitation et on aura une matrice RPA qui est constituée par les deux matrices \mathcal{A} et \mathcal{B} de dimension (2×2) chacune

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}_{+q_3} = \mathcal{A}_{-q_3} \quad \mathcal{B} = \mathcal{B}_{\pm q_3} \quad (3.63)$$

et qui donne les mêmes valeurs propres qu'avant.

L'énergie fondamentale RPA est donnée par la formule standard [2]

$$\begin{aligned} E_{RPA} &= E_{HF} - \sum_{\nu} \mathcal{E}_{\nu} \sum_i |\mathcal{Y}_i^{\nu}|^2 \\ &= E_{HF} - \frac{1}{2} \text{tr}(\mathcal{A}) - \frac{1}{2} \sum_{\nu} \mathcal{E}_{\nu} \end{aligned} \quad (3.64)$$

où i décrit tous les couples $\{p, h, \sigma\}$. Avant de discuter ces résultats, on développera d'abord les équations SCRPA.

3.2.3 *ph* -SCRPA

Comme on l'a vu avec la *ph* -RPA standard, le module du vecteur d'onde de transfert est un bon nombre quantique alors qu'on a seulement le couplage en $+q$ et $-q$ par l'intermédiaire de la matrice \mathcal{B} . De même, avec la *ph* -SCRPA, on reste avec cette subdivision de l'espace *ph* complet. En plus, pour avoir une idée générale sur les fonctions de corrélations à calculer par la *ph* -SCRPA, on donne quelques éléments de la matrice $\mathcal{A}_{|q_3|=\frac{\pi}{3}}$. En effet, par exemple

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_{1,1} &= \frac{\langle [J_{2\uparrow,4\uparrow}^- [H, J_{4\uparrow,2\uparrow}^+]] \rangle}{(1 - \langle M_{24,\uparrow} \rangle)} \\
&= \epsilon_4 - \epsilon_2 - G \left\{ 2 \langle J_{2\uparrow,4\uparrow}^- (J_{3\downarrow,5\downarrow}^- + J_{4\downarrow,2\downarrow}^+) \rangle \right. \\
&\quad + \langle (J_{1\uparrow,4\uparrow}^- + J_{2\uparrow,6\uparrow}^-) [(J_{1\downarrow,5\downarrow}^- + J_{3\downarrow,6\downarrow}^- + J_{4\downarrow,1\downarrow}^+ + J_{6\downarrow,2\downarrow}^+) + S_{5\downarrow,4\downarrow}^+ - S_{3\downarrow,2\downarrow}^+] \rangle \\
&\quad + \langle (J_{3\uparrow,4\uparrow}^- + J_{2\uparrow,5\uparrow}^-) [(J_{1\downarrow,6\downarrow}^- + J_{2\downarrow,5\downarrow}^- + J_{3\downarrow,4\downarrow}^-) + cc] \rangle \\
&\quad + 2 \langle J_{2\uparrow,4\uparrow}^- [(S_{5\downarrow,6\downarrow}^- + S_{6\downarrow,4\downarrow}^+) - (S_{1\downarrow,2\downarrow}^- + S_{3\downarrow,1\downarrow}^+)] \rangle \\
&\quad \left. + \langle (S_{1\uparrow,2\uparrow}^- + S_{6\uparrow,4\uparrow}^+) [(J_{2\downarrow,4\downarrow}^- + J_{5\downarrow,3\downarrow}^+) - (S_{2\downarrow,1\downarrow}^+ + S_{1\downarrow,3\downarrow}^-) + (S_{4\downarrow,6\downarrow}^- + S_{6\downarrow,5\downarrow}^+)] \rangle \right\} \\
&\quad \cdot (1 - \langle M_{24,\uparrow} \rangle)^{-1} \\
\mathcal{A}_{2,1} &= \frac{\langle [J_{2\downarrow,4\downarrow}^- [H, J_{4\uparrow,2\uparrow}^+]] \rangle}{\sqrt{(1 - \langle M_{24,\downarrow} \rangle) (1 - \langle M_{24,\uparrow} \rangle)}} \\
&= G \left\{ \langle (1 - M_{24,\uparrow}) (1 - M_{24,\uparrow}) \rangle + \langle (J_{4\uparrow,1\uparrow}^+ - J_{6\uparrow,2\uparrow}^+) (J_{1\downarrow,4\downarrow}^- - J_{2\downarrow,6\downarrow}^-) \rangle \right. \\
&\quad + \langle (J_{4\uparrow,3\uparrow}^+ - J_{5\uparrow,2\uparrow}^+) (J_{3\downarrow,4\downarrow}^- - J_{2\downarrow,5\downarrow}^-) \rangle + \langle (S_{2\uparrow,1\uparrow}^+ + S_{4\uparrow,6\uparrow}^-) (S_{1\downarrow,2\downarrow}^- + S_{6\downarrow,5\downarrow}^+) \rangle \\
&\quad \left. + \langle (S_{2\uparrow,3\uparrow}^- + S_{4\uparrow,5\uparrow}^-) (S_{3\downarrow,2\downarrow}^+ + S_{5\downarrow,4\downarrow}^+) \rangle \right\} \cdot \{(1 - \langle M_{24,\downarrow} \rangle) (1 - \langle M_{24,\uparrow} \rangle)\}^{-\frac{1}{2}} \\
&\vdots
\end{aligned} \tag{3.65}$$

On voit que ces éléments de matrice contiennent différentes fonctions de corrélations de type $\langle J^\pm J^\pm \rangle$, $\langle S^\pm J^\pm \rangle$ et $\langle S^\pm S^\pm \rangle$. Avec la *ph* -SCRPA, on peut exprimer les fonctions de corrélations de type $\langle J^\pm J^\pm \rangle$ en fonction des amplitudes RPA (\mathcal{X}, \mathcal{Y}). On va voir que les autres fonctions ($\langle S^\pm J^\pm \rangle$ et $\langle S^\pm S^\pm \rangle$) ont une faible contribution par rapport aux termes $\langle J^\pm J^\pm \rangle$. On avait vu dans le chapitre (2.2) que pour le cas à deux sites, elles n'apparaissent pas et elles ne contribuent pas non plus à la RPA standard. On va donner à la fin du chapitre lorsqu'on discutera les règles de somme en (3.3) une ample discussion si c'est approprié ou non d'inclure ces termes $S_{pp'} = b_p^\dagger b_{p'} = a_p^\dagger a_{p'}$, qu'on appelle souvent

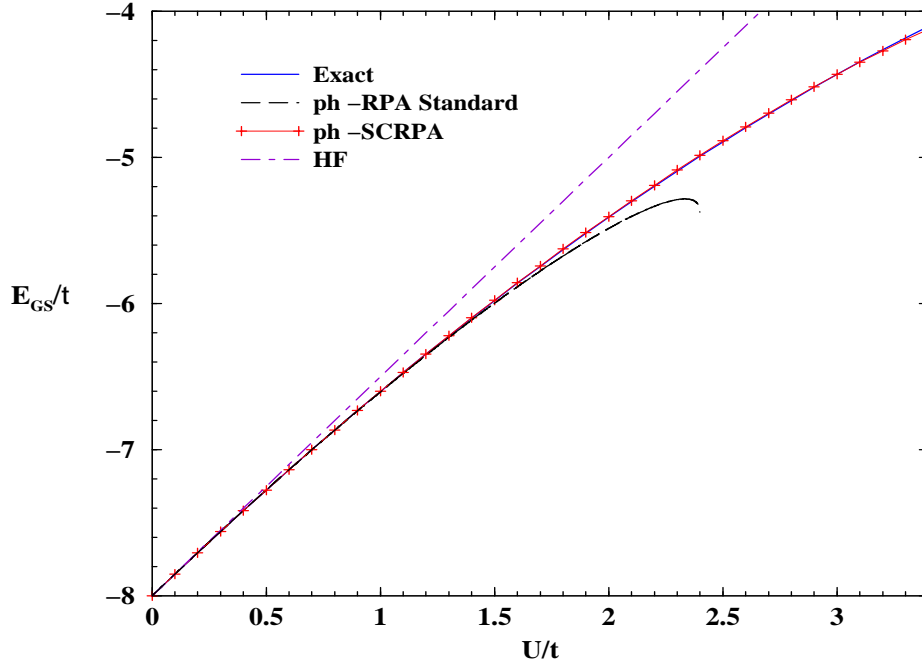


FIG. 3.2 – L'énergie de l'état fondamental du système à 6-sites demi-pleins avec la projection de spin $m_s = 0$ pour la réponse de charge dans le canal *ph*.

aussi termes de diffusion ou termes "anormaux". En tout cas, ici dans ce travail nous ne prenons pas en compte les termes du type $\langle S^\pm J^\pm \rangle$ et $\langle S^\pm S^\pm \rangle$. Les équations SCRPA sont fermées et on peut procéder à leurs résolutions ce qui se fait par itération en initialisant avec les résultats de la RPA standard. La valeur absolue du transfert $|q|$ reste évidemment toujours un bon nombre quantique et on peut donc résoudre les équations pour chaque $|q|$ séparément.

Cependant, en dehors de ces termes de diffusion ou termes "anormaux" dont on vient de parler, on doit écarter une deuxième catégorie de termes. Ce sont les termes qui à travers la self consistance coupleraient les différentes voies en transfert $|q|$. Par exemple dans l'expression (3.65) pour l'élément $\mathcal{A}_{1,1}$ où le canal $|q_3| = \frac{\pi}{3}$ est explicitement traité, ce canal est implicitement couplé à la voie $|q_1| = \frac{2\pi}{3}$ à travers le terme (voir l'expression pour $\mathcal{A}_{1,1}$)

$$\left\langle \left(J_{1\uparrow,4\uparrow}^- + J_{2\uparrow,6\uparrow}^- \right) \left(J_{1\downarrow,5\downarrow}^- + J_{3\downarrow,6\downarrow}^- + J_{4\downarrow,1\downarrow}^+ + J_{6\downarrow,2\downarrow}^+ \right) \right\rangle$$

et à travers la voie $|q_2| = \pi$ par

$$\left\langle \left(J_{3\uparrow,4\uparrow}^- + J_{2\uparrow,5\uparrow}^- \right) \left[\left(J_{1\downarrow,6\downarrow}^- + J_{2\downarrow,5\downarrow}^- + J_{3\downarrow,4\downarrow}^- \right) + cc \right] \right\rangle$$

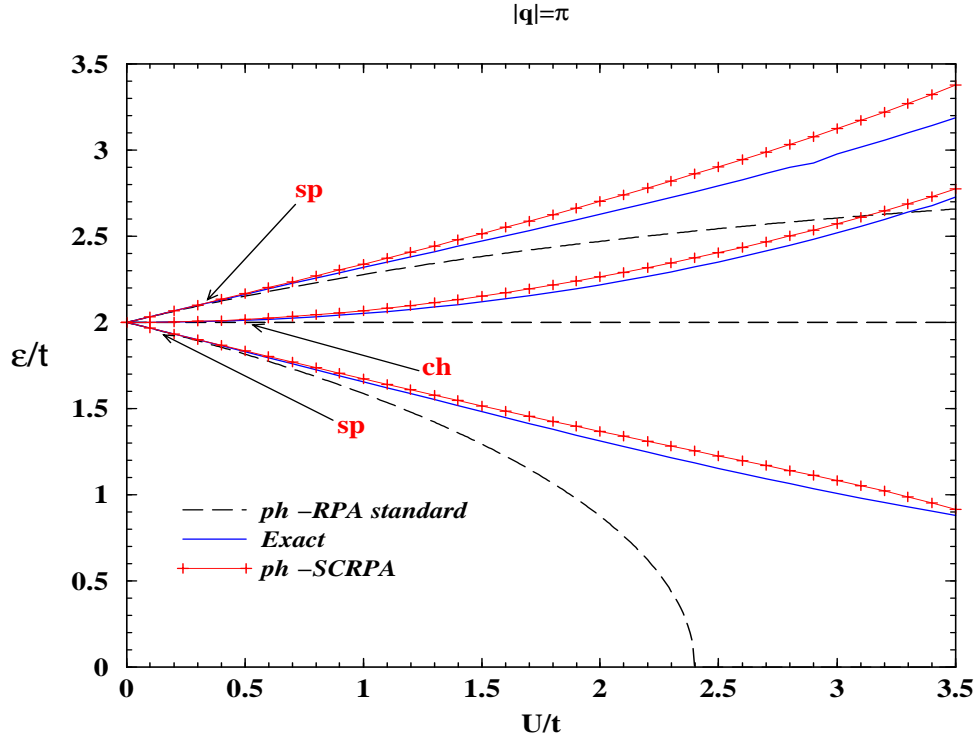


FIG. 3.3 – Spectre d'excitation ph du système à 6-sites demi-pleins avec la projection de spin $m_s = 0$ pour le vecteur d'onde de transfert $|q| = \pi$.

Il est cependant dangereux de mélanger les voies par le biais de la non-linéarité, car les fondamentaux définis implicitement dans la relation (3.13) ne sont pas forcément exactement les mêmes pour les différents canaux. Nous rappelons à cet égard que la relation $Q_\nu|0\rangle = 0$ n'est soluble explicitement que dans des cas très particuliers (2 électrons par exemple) et que par conséquent dans le cas général (3.13) est à considérer comme une relation auxiliaire qui permet de fermer le système d'équations mais qui ne permet pas de conclure à l'existence d'un fondamental unique. C'est pour cette raison qu'on doit découpler complètement les différentes voies de transfert. Ce même constat a déjà été fait dans des travaux antérieurs [50]. Notons en passage que dans le cas à deux sites cette question ne se posait pas car il n'existait qu'un seul transfert. Les résultats SCRPA que nous allons discuter maintenant ont donc été obtenus en négligeant les termes "anormaux" et en découplant les différentes voies de transfert. Nous répétons qu'ainsi les équations SCRPA sont fermées et on peut procéder à la résolution. Nous donnons ici pour le transfert $|q| = \frac{\pi}{3}$ la totalité des éléments de matrice SCRPA \mathcal{A} et \mathcal{B} telle qu'elle a été utilisée dans le calcul numérique. Pour d'autres transferts on aura des expressions analogues. En effet avec les

abréviations suivantes

$$i = 1 \equiv (2 \uparrow, 4 \uparrow) \quad i = 2 \equiv (2 \downarrow, 4 \downarrow) \quad i = 3 \equiv (3 \uparrow, 5 \uparrow) \quad i = 4 \equiv (3 \downarrow, 5 \downarrow)$$

les éléments de matrices \mathcal{A} et \mathcal{B} sont données par

$$\mathcal{A}_{i,j} = \frac{\langle [J_i^-, [H, J_j^+]] \rangle}{\sqrt{(1 - \langle M_i \rangle)(1 - \langle M_j \rangle)}} \quad \mathcal{B}_{i,j} = -\frac{\langle [J_i^-, [H, J_j^-]] \rangle}{\sqrt{(1 - \langle M_i \rangle)(1 - \langle M_j \rangle)}}$$

avec $i = 1, \dots, 4$, ainsi,

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{1,1} &= \epsilon_4 - \epsilon_2 - 2G \frac{\langle J_{2\uparrow,4\uparrow}^- (J_{3\downarrow,5\downarrow}^- + J_{4\downarrow,2\downarrow}^+) \rangle}{1 - \langle M_{24,\uparrow} \rangle}, \\ \mathcal{A}_{2,1} &= G \frac{\langle (1 - M_{24,\uparrow})(1 - M_{24,\uparrow}) \rangle}{\sqrt{(1 - \langle M_{24,\downarrow} \rangle)(1 - \langle M_{24,\uparrow} \rangle)}}, \\ \mathcal{A}_{3,1} &= \mathcal{A}_{4,1} = 0, \quad \mathcal{A}_{2,2} = \epsilon_4 - \epsilon_2 - 2G \frac{\langle (J_{3\uparrow,5\uparrow}^- + J_{4\uparrow,2\uparrow}^+) J_{2\downarrow,4\downarrow}^- \rangle}{1 - \langle M_{24,\downarrow} \rangle}, \\ \mathcal{A}_{3,2} &= \mathcal{A}_{4,2} = 0, \quad \mathcal{A}_{3,3} = \epsilon_5 - \epsilon_3 - 2G \frac{\langle J_{3\uparrow,5\uparrow}^- (J_{2\downarrow,4\downarrow}^- + J_{5\downarrow,3\downarrow}^+) \rangle}{1 - \langle M_{35,\uparrow} \rangle}, \\ \mathcal{A}_{4,3} &= G \frac{\langle (1 - M_{35,\uparrow})(1 - M_{35,\uparrow}) \rangle}{\sqrt{(1 - \langle M_{35,\downarrow} \rangle)(1 - \langle M_{35,\uparrow} \rangle)}}, \\ \mathcal{A}_{4,4} &= \epsilon_5 - \epsilon_3 - 2G \frac{\langle (J_{2\uparrow,4\uparrow}^- + J_{5\uparrow,3\uparrow}^+) J_{3\downarrow,5\downarrow}^- \rangle}{1 - \langle M_{35,\downarrow} \rangle}, \\ \mathcal{B}_{1,1} &= -2G \frac{\langle J_{2\uparrow,4\uparrow}^- (J_{2\downarrow,4\downarrow}^- + J_{5\downarrow,3\downarrow}^+) \rangle}{1 - \langle M_{24,\uparrow} \rangle}, \quad \mathcal{B}_{2,1} = \mathcal{B}_{3,1} = 0, \\ \mathcal{B}_{4,1} &= G \frac{\langle (1 - M_{24,\uparrow})(1 - M_{35,\downarrow}) \rangle}{\sqrt{(1 - \langle M_{35,\downarrow} \rangle)(1 - \langle M_{24,\uparrow} \rangle)}}, \\ \mathcal{B}_{2,2} &= -2G \frac{\langle (J_{2\uparrow,4\uparrow}^- + J_{5\uparrow,3\uparrow}^+) J_{2\downarrow,4\downarrow}^- \rangle}{1 - \langle M_{24,\downarrow} \rangle}, \\ \mathcal{B}_{3,2} &= G \frac{\langle (1 - M_{35,\uparrow})(1 - M_{24,\downarrow}) \rangle}{\sqrt{(1 - \langle M_{24,\downarrow} \rangle)(1 - \langle M_{35,\uparrow} \rangle)}}, \quad \mathcal{B}_{4,2} = 0 \\ \mathcal{B}_{3,3} &= -2G \frac{\langle J_{3\uparrow,5\uparrow}^- (J_{3\downarrow,5\downarrow}^- + J_{4\downarrow,2\downarrow}^+) \rangle}{1 - \langle M_{35,\uparrow} \rangle}, \quad \mathcal{B}_{4,3} = 0, \end{aligned}$$

$$\mathcal{B}_{4,4} = -2G \frac{\langle (J_{3\uparrow,5\uparrow}^- + J_{4\uparrow,2\uparrow}^+) J_{3\downarrow,5\downarrow}^- \rangle}{1 - \langle M_{35,\downarrow} \rangle}. \quad (3.66)$$

Ajoutons que les matrices \mathcal{A} et \mathcal{B} sont symétriques et que les valeurs moyennes en (3.66) s'expriment à l'aide de (3.19) et (3.22) en fonction des amplitudes \mathcal{X} , \mathcal{Y} .

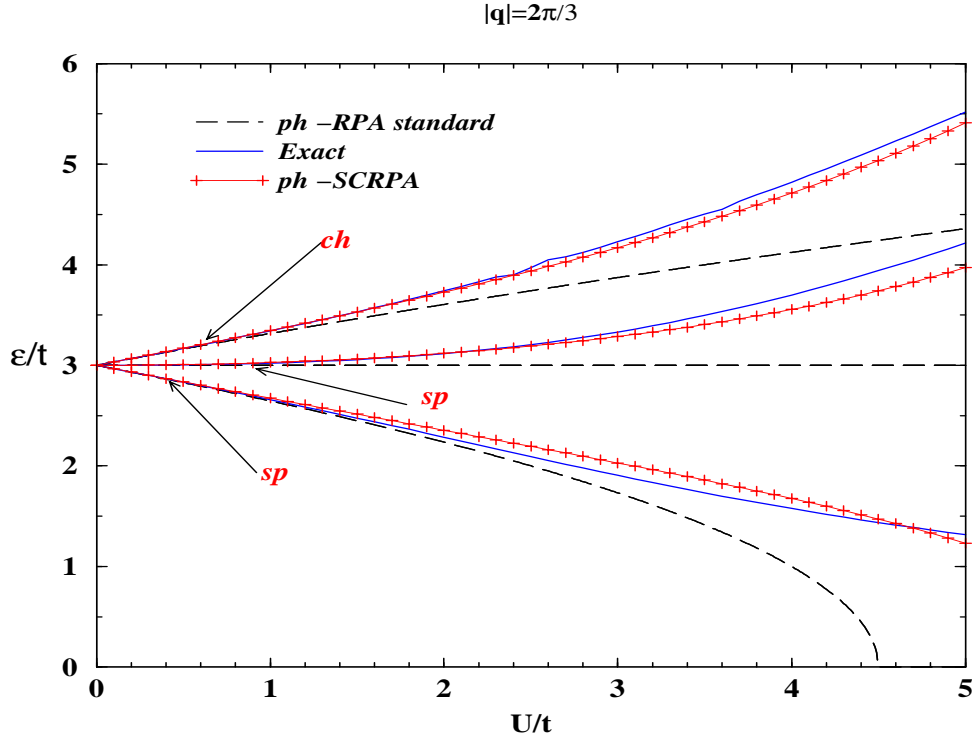


FIG. 3.4 – Spectre d'excitation *ph* du système à 6-sites demi-pleins avec la projection de spin $m_s = 0$ pour le vecteur d'onde de transfert $|q| = \frac{2\pi}{3}$.

Les résultats de la *ph*-SCRPA pour l'énergie du fondamental et pour les énergies d'excitations sont présentés en Fig. 3.2 et Figs. 3.3, 3.4 et 3.5, respectivement. Sur la Fig. 3.2, on voit l'énergie HF en trait point-tiré. Elle sous-lie assez fortement par rapport à la solution exacte (trait plein). Les valeurs de l'énergie du fondamental en s-RPA s'arrêtent évidemment là où se trouve l'instabilité la plus proche, c-à-d dans le canal $q = \pi$ à $U = \frac{12}{5}t$. Au delà de $U = 2$, elle sur-lie fortement. Les valeurs SCRPA sont données par les croix. On voit qu'on obtient un excellent résultat qui se confond pratiquement jusqu'à $U = 3.5$ avec le résultat exact dans l'épaisseur du trait. Pour donc avoir une meilleure appréciation, nous présentons les résultats des différentes approximations dans le tableau (Tab.3.1). Nous avons arrêté le calcul à $U = 3.5t$ car la convergence ne se produisait

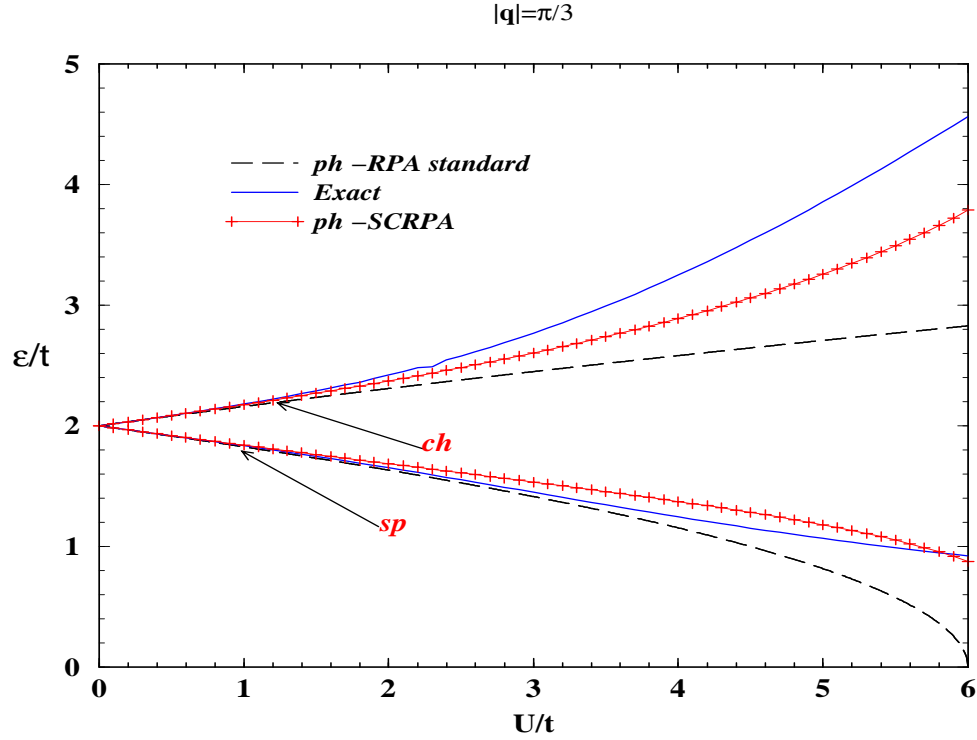


FIG. 3.5 – Spectre d'excitation *ph* du système à 6-sites demi-pleins avec la projection de spin $m_s = 0$ pour le vecteur d'onde de transfert $|q| = \frac{\pi}{3}$.

plus très bien au delà. Ce fait est une constante de la SCRPA: en dehors de quelques cas particuliers, comme notamment le cas à deux particules, on ne peut, dans la base non-brisée de symétrie, dépasser indéfiniment le point de transition de phase donné par la RPA standard. Comme pour cette dernière on devrait alors formuler une SCRPA dans la base d'un champ moyen avec symétrie brisée. Ceci est, en principe, possible comme cela a été démontré sur plusieurs modèles par d'autres auteurs [10]. Seulement ce changement de base n'est pas complètement sans problème. Notamment les résultats SCRPA ne sont pas tout à fait continus lorsqu'on effectue le changement de base au moment où les iterations SCRPA dans la base non-brisée ne convergent plus. Schuck et collaborateurs travaillent actuellement à une élimination de ce défaut. C'est pour cette raison et aussi pour des raisons que le temps pour préparer cette thèse est bien fini que nous nous sommes pas aventurés dans la phase avec symétrie brisée.

Sur la figure (Fig.3.3), nous présentons les résultats pour les énergies d'excitations concernant le transfert $|q| = \pi$. Nous voyons ici que dans ce canal la RPA standard montre une instabilité à $U = \frac{12}{5}t$. Au voisinage de ce point de transition la solution exacte ne

U	E_{GS}^{HF}	E_{GS}^{ph-RPA}	$E_{GS}^{ph-SCRPA}$	E_{GS}^{exact}
0.0	-8.0	-8.00000000	-8.00000000	-8.00000000
0.4	-7.4	-7.41619730	-7.41612196	-7.41612329
0.8	-6.8	-6.86587429	-6.86451340	-6.86463657
1.2	-6.2	-6.35277271	-6.34511757	-6.34594838
1.6	-5.6	-5.88544607	-5.85807419	-5.86066333
2.0	-5.0	-5.48615360	-5.40482712	-5.40945685
2.4	-4.4	-5.31865931	-4.98579121	-4.99289207
2.6	-4.1		-4.79000664	-4.79769106
2.8	-3.8		-4.60383844	-4.61119783
3.0	-3.5		-4.42797756	-4.43335361
3.2	-3.2		-4.26388264	-4.26405565
3.4	-2.9		-4.11429071	-4.10315568

TAB. 3.1 – *Comparaison des résultats de l'approximation HF, ph -RPA standard, ph -SCRPA et exacts pour l'énergie fondamentale dans le cas à 6-sites.*

montre aucun signe d'instabilité. Il est très satisfaisant que la SCRPA suit de très près cette solution exacte et ceci bien au delà du point de transition. La même chose se remarque pour les deux autres états présents dans ce canal. Dans le canal $|q| = \frac{2\pi}{3}$, l'instabilité RPA se produit pour $U = \frac{9}{2}t$ (voir Fig.3.4). Les mêmes remarques que pour $|q| = \pi$ s'appliquent pour la SCRPA. L'accord avec les résultats exacts est très bon. Pour $|q| = \frac{\pi}{3}$, nous avons deux états excités (voir Fig.3.5). Pour le premier, la SCRPA reproduit de nouveau très bien le comportement exact. Par contre, et c'est la seule exception, le deuxième état n'est pas approché d'aussi près par la SCRPA que dans tous les autres cas. Cependant, on constate encore une très nette amélioration par rapport à la RPA standard: l'écart avec la solution exacte est réduit à peu près d'un facteur deux.

En concluant ce chapitre, nous pouvons constater que, dans ce canal, pour des corrélations du type densité-densité, la SCRPA améliore fortement la RPA standard et elle est en excellent accord avec le résultat exact. Au lieu de regarder le canal du spin transverse pour lequel nous pouvons supposer la même performance de la SCRPA que dans le canal de charge, nous allons étudier le canal particule-particule. Egalement, avant de faire ceci, nous allons regarder, comme pour le cas à deux sites, pour ce système la règle de somme pondérée par l'énergie.

3.3 Règle de somme pondérée par l'énergie

Nous avons déjà vu dans le chapitre (Chap. 2) sur le modèle de Hubbard à deux sites que l'étude de la règle de somme pondérée par l'énergie était un moyen puissant de tester la consistance de la théorie SCRPA.

Reécrivons donc la règle de somme pondérée par l'énergie

$$\sum_{\nu} (E_{\nu} - E_0) |\langle \nu | F | 0 \rangle|^2 = \frac{1}{2} \langle 0 | [F, [H, F]] | 0 \rangle \quad (3.67)$$

comme dans le cas à 2-sites nous allons considérer comme opérateur de transition

$$F = \sum_{i(q)} \left(J_i^+ + h.c \right) . \quad (3.68)$$

Le membre de gauche de (3.67) (MG) est évidemment exprimée par énergies d'excitations et les amplitudes SCRPA. On obtient

$$\begin{aligned} MG &\equiv \sum_{\nu, q} (E_{\nu} - E_0) |\langle \nu | F | 0 \rangle|^2 \\ &= \sum_{\nu, q} (E_{\nu} - E_0) |\langle 0 | Q_{\nu} F | 0 \rangle|^2 \\ &= \sum_{\nu, q} (E_{\nu} - E_0) |\langle 0 | Q_{\nu} F | 0 \rangle|^2 \\ &= \sum_{\nu, q} (E_{\nu} - E_0) |\langle 0 | [Q_{\nu}, F] | 0 \rangle|^2 \\ &= \sum_{\nu, q} (E_{\nu} - E_0) \left| \sum_{i(q)} \sqrt{1 - M_i} (\mathcal{X}_i^{\nu} + \mathcal{Y}_i^{\nu}) \right|^2 . \end{aligned} \quad (3.69)$$

En calculant le double commutateur du membre de droite (MD), on obtient

$$MD \equiv \frac{1}{2} \langle 0 | [F, [H, F]] | 0 \rangle = \sum_{i(q)} \sqrt{1 - M_i} \sum_{i'(q)} \sqrt{1 - M_{i'}} (\mathcal{A}_{i, i'} - \mathcal{B}_{i, i'}) . \quad (3.70)$$

En RPA standard, on exprime le MG par énergie et amplitudes en s-RPA et on remplace dans MD la valeur moyenne par celle dans l'état de $|HF\rangle$. On vérifie directement qu'à ce moment, comme cela doit l'être en s-RPA, la règle de somme (3.67) est satisfaite.

Regardons maintenant ce que (3.67) donne en utilisant la SCRPA. Nous allons rencontrer ici un problème que nous avons déjà évoqué en (3.2.3) c'est à dire l'inclusion ou non dans l'opérateur SCRPA des termes de diffusion ou anormaux, $S_{pp'}$ ou $S_{hh'}$. En RPA standard, la contribution de ces termes est identiquement nulle et on peut donc les négliger dès le départ. Par contre en SCRPA leur contribution n'est pas nulle et on ne voit pas de raison, à priori, pourquoi ne pas les inclure. Comme en SCRPA la distribution en nombre

d'occupation est arrondie c'est à dire pas une fonction d'échelon comme en HF et s-RPA, la SCRPA prend formellement la même structure mathématique que la RPA standard à température finie où les nombres d'occupation sont aussi arrondis et des configurations $a_p^\dagger a_{p'}$ et $a_h^\dagger a_{h'}$ sont parfaitement possibles. Nous les avons exclus ici pour des raisons pratiques que nous allons expliquer plus loin. Cependant à ce moment pour des raisons de consistance, il faut aussi les exclure dans H c'est à dire supprimer les termes en S , comme nous l'avons fait pour le calcul de l'énergie du fondamental entre autre. Si donc en MD de (3.67) on élimine ces termes en S dans H , nous montrons que la règle de somme est à nouveau parfaitement satisfaite. Cependant, nous pouvons aussi évaluer le MD en gardant les termes en S dans H et ainsi évaluer leur importance. Ceci est montré sur la figure (Fig.3.6). Nous voyons que à ce moment la règle de somme est violée mais cette violation reste dans des proportions très modérées, elle est au maximum de 0.5% à $U = 3t$.

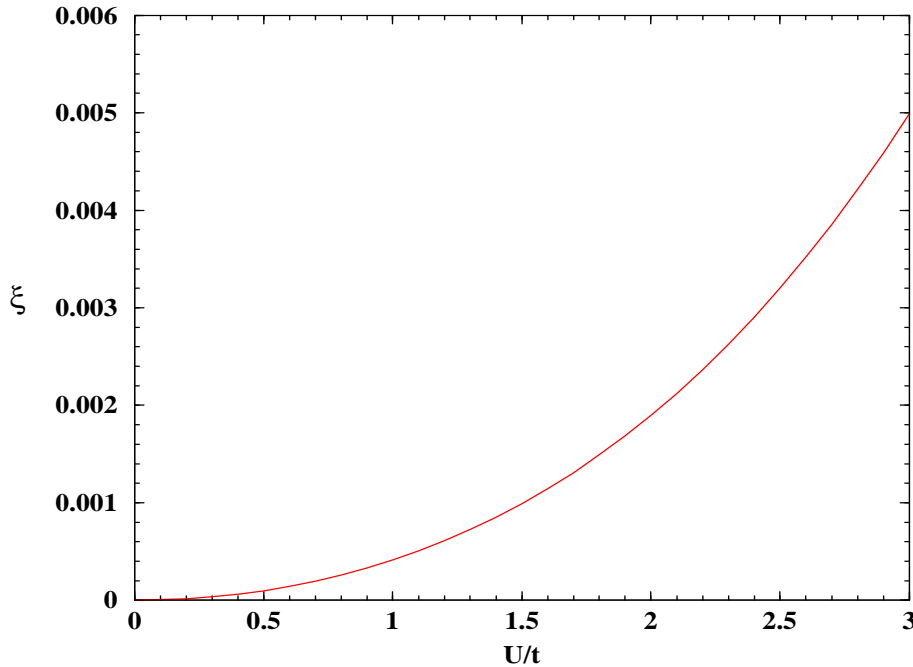


FIG. 3.6 – Rapport, $R = \frac{MD-MG}{MD}$, de la règle de somme pondérée par l'énergie dans la réponse de charge pour le cas à 6-sites. On note par MD et MG les membres de droite et de gauche de l'égalité (3.67) qui sont calculés avec la SCRPA.

Comme nous avons déjà dit, si on veut que la règle de somme soit satisfaite en prenant le H complet dans MD , nous aurions dû inclure les opérateurs $S_{pp'} = b_p^\dagger b_{p'}^\dagger$ et $S_{hh'} = b_h^\dagger b_{h'}^\dagger$ dans les opérateurs d'excitations RPA, $Q_{q,\nu}^\dagger$. Ceci a été fait dans un travail récent [53] et en effet la règle de somme était satisfaite avec l'Hamiltonien complet. Ici nous avons dû

renoncer à en tenir compte car ces composantes engendrent dans la matrice norme des termes du type $n_p - n_{p'}$ ce qui peut donner lieu à des valeurs très petites. Comme il faut, dans les équations SCRPA, diviser par la matrice norme cela peut engendrer des difficultés numériques. Ceci a été le cas ici et notamment cela a engendré une mauvaise convergence dans le cycle itératif de la résolution des équations SCRPA et nous a contraint de laisser tomber les termes en “ S ”. Comme les résultats satisfaisants de la règle de somme indiquent, l’importance des termes en S semble être très faible. Ceci justifie donc à posteriori de les avoir négliger dès le départ.

3.4 Séparation en excitations de ‘charge’ et de ‘spin longitudinal’

Le lecteur attentif aura remarqué que, pour l’instant, nous n’avons pas triés nos solutions selon si elles sont du type charge (ch), c’est à dire les composantes en spin $-\uparrow$ et $-\downarrow$ s’arrangent comme $J_{ph\uparrow}^+ + J_{ph\downarrow}^+$ ou $J_{ph\uparrow}^- + J_{ph\downarrow}^-$, où si elles sont du type spin (sp), c’est à dire $J_{ph\uparrow}^+ - J_{ph\downarrow}^+$ ou $J_{ph\uparrow}^- - J_{ph\downarrow}^-$. En RPA standard cette séparation se fait automatiquement et nous pouvons identifier les deux types de solutions exactement. Nous avons donc indiqué sur les figures si l’excitation est du type ‘charge’ ou ‘spin’. Par contre en SCRPA, dû au

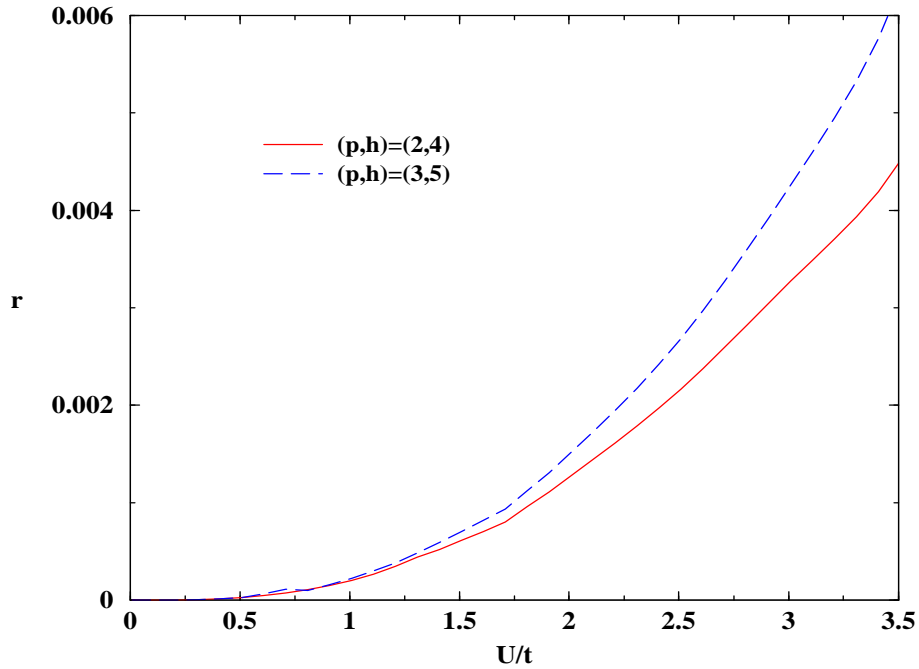


FIG. 3.7 – Le rapport, r (ég. 3.71), en fonction de l’interaction U pour les excitations particule-trou $(2,4)$ et $(3,5)$ du canal $q = |\frac{\pi}{3}|$.

fait que nous avons négligé les composantes du type ‘ S ’ dans H et dans la matrice SCRPA, la symétrie de “ $spin$ ” et de “ $charge$ ” ne se séparent plus exactement. Cependant, cette séparation reste vérifiée à une très bonne approximation prêt. Ceci est démontré sur la figure (Fig.3.7) où nous donnons quelques rapports

$$r = \frac{|\mathcal{X}_{ph\uparrow}^\nu| - |\mathcal{X}_{ph\downarrow}^\nu|}{|\mathcal{X}_{ph\uparrow}^\nu| + |\mathcal{X}_{ph\downarrow}^\nu|} \quad (3.71)$$

Nous voyons que la violation de la symétrie de spin reste toujours inférieure à 0.6% ce qui démontre à nouveau la très faible importance des termes du type “ S ” justifiant ainsi, à nouveau, le fait de les avoir négligés.

3.5 Nombre d’occupations

Les nombres d’occupations sont représentés sur les figures (Figs. 3.8 et 3.9) pour les

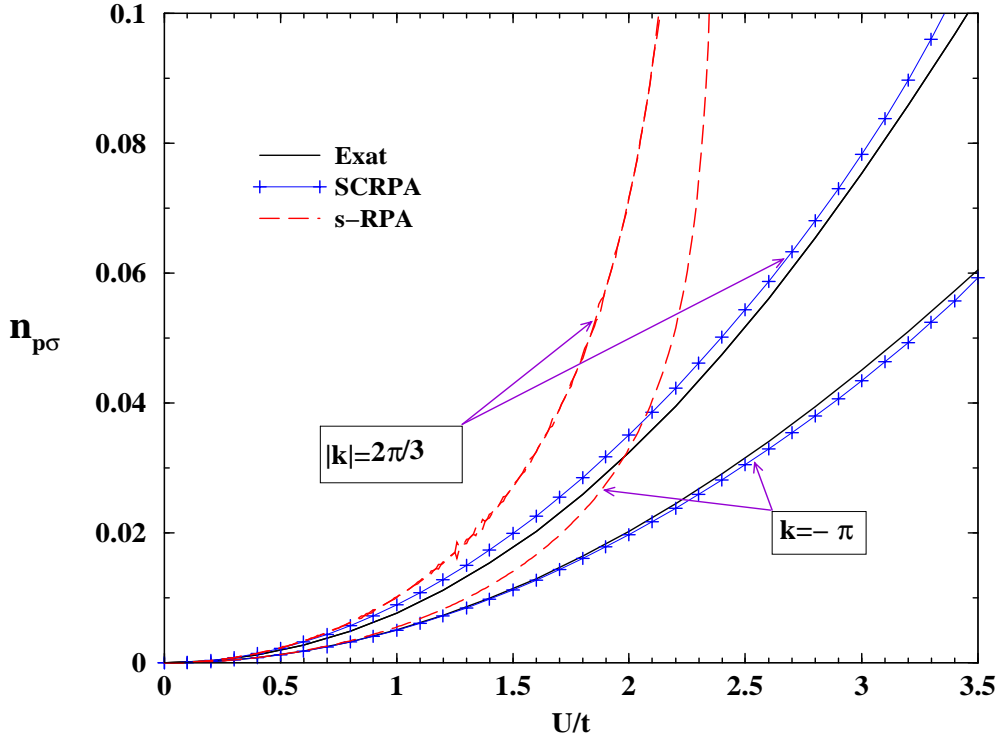


FIG. 3.8 – Nombre d’occupation en fonction de l’interaction U pour différentes valeurs du moment k pour les états de particules. Pour chacune des approximations (s -RPA et SCRPA), les nombres d’occupations sont représentés par ordre croissant en k ($-\pi$, $-\frac{2\pi}{3}$, $\frac{2\pi}{3}$). Remarquons que les modes $k = \frac{2\pi}{3}$ et $k = -\frac{2\pi}{3}$ sont dégénérés.

états de particules et de trous, respectivement. On voit bien que la solution de la s-RPA diverge au premier point de transition de phase ($U_c = \frac{12t}{5} = 2.4t$) qu'on peut l'apercevoir aussi à partir de l'expression de $\langle \hat{n}_{k\sigma} \rangle$,

$$\begin{aligned} n_{p\sigma} = \langle \hat{n}_{p\sigma} \rangle &= \sum_h (1 - M_{ph\sigma}) \sum_\nu |\mathcal{Y}_{ph\sigma}^\nu|^2, \\ n_{h\sigma} = \langle \hat{n}_{h\sigma} \rangle &= 1 - \sum_p (1 - M_{ph\sigma}) \sum_\nu |\mathcal{Y}_{ph\sigma}^\nu|^2. \end{aligned} \quad (3.72)$$

Ces expressions correspondent à celles données dans un autre contexte par Catara [38]. Elles réduisent aux expressions de la RPA standard en négligeant les $M_{ph\sigma}$ dans (3.72). En

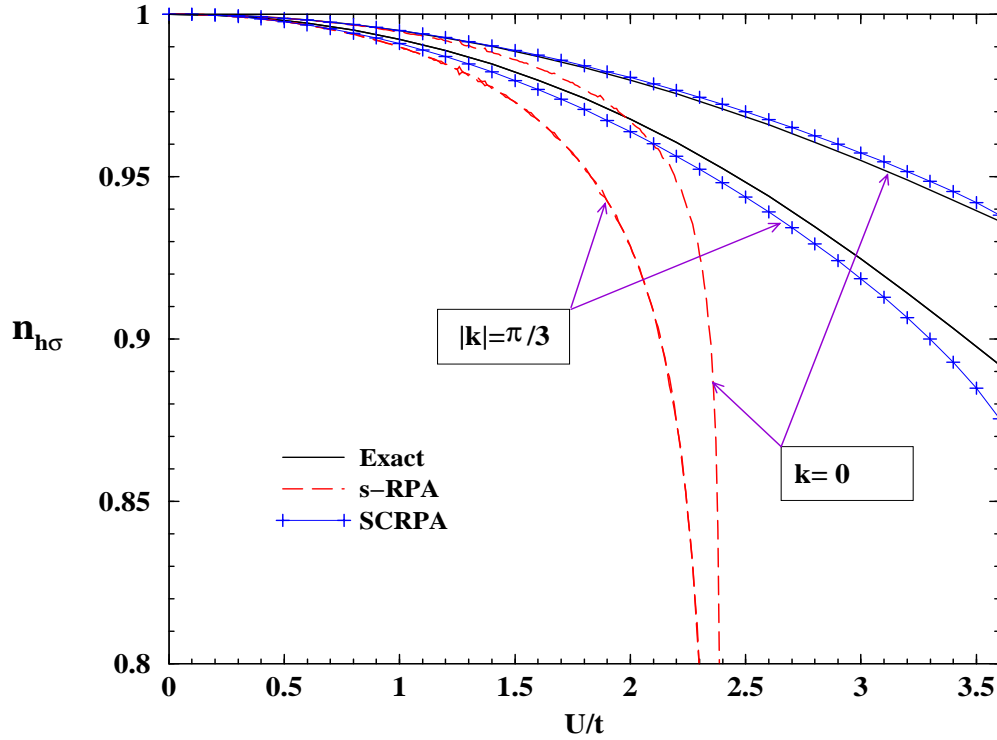


FIG. 3.9 – Nombre d'occupation en fonction de l'interaction U pour différentes valeurs du moment k pour les états de trous. Pour chacune des approximations (s-RPA et SCRPA), les nombres d'occupations sont représentés comme $k = 0, \frac{\pi}{3}, -\frac{\pi}{3}$. Remarquons que les modes $k = \frac{\pi}{3}$ et $k = -\frac{\pi}{3}$ sont dégénérés.

revanche, la SCRPA peut aller jusqu'à $U = 3.5t$ toute en restant continue et assez proche de la solution exacte.

3.6 Réponse du canal particule-particule

Comme dans le cas à 2-sites, nous voulons également considérer pour les 6-sites la SCRPA dans le canal particule-particule. Nous avons vu que la RPA particule-particule nous donne accès aux états à $N \pm 2$ particules si l'état en considération est à N particules. Le canal pp est particulièrement adopté pour traiter les corrélations à courte portée. Nous avons vu que dans le cas à deux sites aussi la pp -SCRPA donnait le résultat exact. Pour le cas à 6-sites, on ne retrouvera évidemment plus la solution exacte. A ce moment, on peut se poser la question si la pp -SCRPA sera capable de tenir compte correctement des corrélations à longue portée certainement contenues dans le modèle de Hubbard. Comme nous allons voir ce ne sera que partiellement le cas.

Par analogie, on définit les opérateurs pp -RPA d'addition et de retranchement de deux particules dans le canal $m_s = 0$ et avec un vecteur d'onde du centre de masse à deux particules K (les notations sont comme auparavant pour le cas à deux sites dans le paragraphe (2.2.6)) :

$$\begin{aligned}
 & - \quad \underline{K = 0 \ (h_1 = h_2 = h_3 = p_1 = p_2 = p_3 = 0)} \\
 & \quad \begin{aligned}
 P_{h_1}^- &= b_{1\downarrow} b_{1\uparrow} & P_{h_2}^- &= b_{2\downarrow} b_{3\uparrow} & P_{h_3}^- &= b_{3\downarrow} b_{2\uparrow} \\
 P_{p_1}^- &= b_{6\downarrow} b_{6\uparrow} & P_{p_2}^- &= b_{5\downarrow} b_{4\uparrow} & P_{p_3}^- &= b_{4\downarrow} b_{5\uparrow}
 \end{aligned}
 \end{aligned} \tag{3.73}$$

$$\begin{aligned}
 & - \quad \underline{K = \frac{\pi}{3} \ (h_4 = h_5 = p_4 = p_5 = \frac{\pi}{3})} \\
 & \quad \begin{aligned}
 P_{h_4}^- &= b_{1\downarrow} b_{2\uparrow} & P_{h_5}^- &= b_{2\downarrow} b_{1\uparrow} & P_{p_4}^- &= b_{6\downarrow} b_{5\uparrow} & P_{p_5}^- &= b_{5\downarrow} b_{6\uparrow}
 \end{aligned}
 \end{aligned} \tag{3.74}$$

$$\begin{aligned}
 & - \quad \underline{K = -\frac{\pi}{3} \ (h_6 = h_7 = p_6 = p_7 = -\frac{\pi}{3})} \\
 & \quad \begin{aligned}
 P_{h_6}^- &= b_{1\downarrow} b_{3\uparrow} & P_{h_7}^- &= b_{3\downarrow} b_{1\uparrow} & P_{p_6}^- &= b_{6\downarrow} b_{4\uparrow} & P_{p_7}^- &= b_{4\downarrow} b_{6\uparrow}
 \end{aligned}
 \end{aligned} \tag{3.75}$$

$$\begin{aligned}
 & - \quad \underline{K = \frac{2\pi}{3} \ (h_8 = p_8 = \frac{2\pi}{3})} \\
 & \quad \begin{aligned}
 P_{h_8}^- &= b_{2\downarrow} b_{2\uparrow} & P_{p_8}^- &= b_{5\downarrow} b_{5\uparrow}
 \end{aligned}
 \end{aligned} \tag{3.76}$$

$$\begin{aligned}
 & - \quad \underline{K = -\frac{2\pi}{3} \ (h_9 = p_9 = -\frac{2\pi}{3})} \\
 & \quad \begin{aligned}
 P_{h_9}^- &= b_{3\downarrow} b_{3\uparrow} & P_{p_9}^- &= b_{4\downarrow} b_{4\uparrow}
 \end{aligned}
 \end{aligned} \tag{3.77}$$

où $h_i = k_{h\uparrow} + k_{h'\downarrow}$ et $p_i = k_{p\uparrow} + k_{p'\downarrow}$.

En plus, afin de rendre la symétrie particule-trou explicite, on introduit la transformation suivante (voir (Chap.1)) :

$$a_{p\sigma} = b_{p\sigma} \ , \quad a_{h\uparrow} = b_{h\downarrow}^\dagger \ , \quad a_{h\downarrow} = -b_{h\uparrow}^\dagger \ , \tag{3.78}$$

et un potentiel chimique, μ , pour que la matrice \mathcal{A} soit égale à la matrice \mathcal{C} . Ceci nous donne une expression de l'hamiltonien (3.10) dans la nouvelle base comme suit

$$\begin{aligned}\mathcal{H}' &= H - \mu \sum_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma} \\ &= \mathcal{H}_{HF} + \mathcal{H}_{nn} + \mathcal{H}_{K=0} + \mathcal{H}_{K=\frac{\pi}{3}} + \mathcal{H}_{K=-\frac{\pi}{3}} + \mathcal{H}_{K=\frac{2\pi}{3}} + \mathcal{H}_{K=-\frac{2\pi}{3}} + \mathcal{H}_R\end{aligned}\quad (3.79)$$

avec

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{HF} &= E_{HF} - 6\mu - (\epsilon_1 - \mu) M_1 - (\epsilon_2 - \mu) M_2 - (\epsilon_3 - \mu) M_3 + (\epsilon_4 - \mu) M_4 \\ &\quad + (\epsilon_5 - \mu) M_5 + (\epsilon_6 - \mu) M_6\end{aligned}$$

$$\mathcal{H}_{nn} = -G \left\{ (\tilde{n}_{6\uparrow} + \tilde{n}_{5\uparrow} + \tilde{n}_{4\uparrow}) (\tilde{n}_{1\uparrow} + \tilde{n}_{2\uparrow} + \tilde{n}_{3\uparrow}) + \uparrow \leftrightarrow \downarrow \right\}$$

$$\mathcal{H}_{K=0} = G \sum_{i,j=1}^3 \left(P_{p_i}^+ P_{p_j}^- + P_{h_i}^+ P_{h_j}^- \right) + G \sum_{i,j=1}^3 \left(P_{h_i}^- P_{p_j}^- + cc \right)$$

$$\mathcal{H}_{K=\frac{\pi}{3}} = G \sum_{i,j=4}^5 \left(P_{p_i}^+ P_{p_j}^- + P_{h_i}^+ P_{h_j}^- \right) + G \sum_{i=4}^5 \left(P_{h_i}^- P_{p_i}^- + cc \right)$$

$$\mathcal{H}_{K=-\frac{\pi}{3}} = G \sum_{i,j=6}^7 \left(P_{p_i}^+ P_{p_j}^- + P_{h_i}^+ P_{h_j}^- \right) + G \sum_{i=6}^7 \left(P_{h_i}^- P_{p_i}^- + cc \right)$$

$$\mathcal{H}_{K=\frac{2\pi}{3}} = G \left(P_{p_8}^+ P_{p_8}^- + P_{h_8}^+ P_{h_8}^- \right) + G \left(P_{h_8}^- P_{p_8}^- + cc \right)$$

$$\mathcal{H}_{K=-\frac{2\pi}{3}} = G \left(P_{p_9}^+ P_{p_9}^- + P_{h_9}^+ P_{h_9}^- \right) + G \left(P_{h_9}^- P_{p_9}^- + cc \right)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_R &= -G \left\{ \left[\left(S_{4\uparrow,6\uparrow}^- + S_{6\uparrow,5\uparrow}^+ \right) - \left(S_{2\downarrow,1\downarrow}^+ + S_{1\downarrow,3\downarrow}^- \right) \right] \left(J_{4\downarrow,2\uparrow}^+ + J_{3\uparrow,5\downarrow}^- \right) \right\} + cc \Big\} \\ &\quad -G \left\{ \left\{ \left(S_{5\uparrow,4\uparrow}^+ - S_{3\downarrow,2\downarrow}^+ \right) \left[\left(J_{5\downarrow,1\uparrow}^+ + J_{1\uparrow,4\downarrow}^- + J_{6\downarrow,3\uparrow}^+ + J_{2\uparrow,6\downarrow}^- \right) \right] \right\} + cc \right\} \\ &\quad -G \left\{ \left\{ \left(J_{1\downarrow,5\uparrow}^- + J_{3\downarrow,6\uparrow}^- \right) \left(J_{5\downarrow,1\uparrow}^+ + J_{6\downarrow,3\uparrow}^+ \right) \right\} + cc \right\} \\ &\quad -G \left\{ \left\{ \left(J_{4\uparrow,1\downarrow}^+ + J_{6\uparrow,2\downarrow}^+ \right) \left(J_{1\uparrow,4\downarrow}^- + J_{2\uparrow,6\downarrow}^- \right) \right\} + cc \right\} \\ &\quad -G \left[\left(J_{1\downarrow,6\uparrow}^- + J_{2\downarrow,5\uparrow}^- + J_{3\downarrow,4\uparrow}^- \right) \left(J_{6\downarrow,1\uparrow}^+ + J_{5\downarrow,2\uparrow}^+ + J_{4\downarrow,3\uparrow}^+ \right) + cc \right], \\ &\quad -G \left\{ \left\{ \left(S_{4\uparrow,6\uparrow}^- + S_{6\uparrow,5\uparrow}^+ \right) \left(S_{1\uparrow,2\uparrow}^- + S_{3\uparrow,1\uparrow}^+ \right) + cc \right\} + (\uparrow \leftrightarrow \downarrow) \right\} \\ &\quad -G \left\{ \left\{ S_{5\uparrow,4\uparrow}^+ S_{2\uparrow,3\uparrow}^- + S_{3\downarrow,2\downarrow}^+ S_{4\downarrow,5\downarrow}^- \right\} + (\uparrow \leftrightarrow \downarrow) \right\}\end{aligned}$$

$$-G \left\{ \left\{ J_{5\uparrow,3\downarrow}^+ J_{3\uparrow,5\downarrow}^- + J_{2\downarrow,4\uparrow}^- J_{4\downarrow,2\uparrow}^+ \right\} + cc \right\} \quad (3.80)$$

avec

$$\begin{aligned} E_{HF} &= -8t + \frac{3U}{2}, \\ \epsilon_1 &= -2t + \frac{U}{2}, \quad \epsilon_2 = \epsilon_3 = -t + \frac{U}{2}, \quad \epsilon_4 = \epsilon_5 = t + \frac{U}{2}, \quad \epsilon_6 = 2t + \frac{U}{2}, \\ \mu &= \frac{U}{2}, \quad G = \frac{U}{6}, \\ M_i &= \tilde{n}_{i\uparrow} + \tilde{n}_{i\downarrow} \quad i = 1, \dots, 6. \end{aligned} \quad (3.81)$$

Cette forme de l'hamiltonien de Hubbard est très similaire à celui du "Picket Fence Model" (Chap. 1), seulement le terme \mathcal{H}_{nn} est en plus. Il joue, cependant, un rôle non négligeable comme on a vu dans le cas à 2-sites (Chap.2). En fait (3.80) a pratiquement la même structure que (2.113) pour deux sites. Ainsi, comme dans le cas à 2-sites, on peut vérifier que le terme en \mathcal{H}_R ne contribue pas aux équations de mouvement pp -SCRPA.

3.6.1 Développement des équations pp -RPA

En général, pour chaque canal, on définit l'opérateur d'addition de deux particules

$$A_\rho^\dagger = \sum_{p_i} \mathcal{X}_{p_i}^\rho \bar{P}_{p_i}^\dagger - \sum_{h_i} \mathcal{Y}_{h_i}^\rho \bar{P}_{h_i}, \quad (3.82)$$

et l'opérateur de retranchement de deux particules

$$R_\lambda^\dagger = - \sum_{p_i} \mathcal{Y}_{p_i}^\lambda \bar{P}_{p_i} + \sum_{h_i} \mathcal{X}_{h_i}^\lambda \bar{P}_{h_i}^\dagger, \quad (3.83)$$

avec

$$\bar{P}_{p_i}^\pm = \frac{P_{p_i}^\pm}{\sqrt{1 - \langle M_{p_i} \rangle}}, \quad \bar{P}_{p_i}^\pm = \frac{P_{p_i}^\pm}{\sqrt{1 - \langle M_{p_i} \rangle}}. \quad (3.84)$$

Avec la symétrie particule-trou, le mode de retranchement satisfait exactement au même système d'équations. Ceci implique que les deux modes ont exactement le même spectre d'excitation et les mêmes fonctions d'ondes. Cette conclusion nous donne les relations suivantes:

$$\begin{aligned} \langle M_{p_i} \rangle &= \langle M_{h_i} \rangle, \\ \langle P_{p_i}^\dagger P_{p_{i'}} \rangle &= \langle P_{h_i}^\dagger P_{h_{i'}} \rangle, & \langle P_{h_i} P_{p_{i'}} \rangle &= \langle P_{p_{i'}}^\dagger P_{h_i}^\dagger \rangle \\ \langle M_{p_i} M_{p_{i'}} \rangle &= \langle M_{h_i} M_{h_{i'}} \rangle, & \langle M_{h_i} M_{p_{i'}} \rangle &= \langle M_{h_{i'}} M_{p_i} \rangle, \end{aligned} \quad (3.85)$$

qui nous permettent d'écrire (comme pour le modèle Picket Fence)

$$\mathcal{X}_{p_i}^\rho = \pm \mathcal{X}_{h_i}^{\lambda=\rho}, \quad \mathcal{Y}_{h_i}^\rho = \pm \mathcal{Y}_{p_i}^{\lambda=\rho}. \quad (3.86)$$

Ainsi, les amplitudes \mathcal{X} et \mathcal{Y} obeissent aux conditions de normalisations

$$\begin{aligned} \sum_{p_i} \mathcal{X}_{p_i}^\rho \mathcal{X}_{p_i}^{\rho'} - \sum_{h_i} \mathcal{Y}_{h_i}^\rho \mathcal{Y}_{h_i}^{\rho'} &= \delta_{\rho\rho'}, \\ \sum_{h_i} \mathcal{X}_{h_i}^\lambda \mathcal{X}_{h_i}^{\lambda'} - \sum_{p_i} \mathcal{Y}_{p_i}^\lambda \mathcal{Y}_{p_i}^{\lambda'} &= \delta_{\lambda\lambda'}, \\ \sum_{p_i} \mathcal{X}_{p_i}^\rho \mathcal{Y}_{p_i}^\lambda - \sum_{h_i} \mathcal{X}_{h_i}^\lambda \mathcal{Y}_{h_i}^\rho &= 0, \end{aligned} \quad (3.87)$$

et aux conditions de fermetures

$$\begin{aligned} \sum_{\rho} \mathcal{X}_{p_i}^\rho \mathcal{X}_{p_i'}^\rho - \sum_{\lambda} \mathcal{Y}_{p_i}^\lambda \mathcal{Y}_{p_i'}^\lambda &= \delta_{p_i p_i'}, \\ \sum_{\lambda} \mathcal{X}_{h_i}^\lambda \mathcal{X}_{h_i'}^\lambda - \sum_{\rho} \mathcal{Y}_{h_i}^\rho \mathcal{Y}_{h_i'}^\rho &= \delta_{h_i h_i'}, \\ \sum_{\lambda} \mathcal{X}_{h_i}^\lambda \mathcal{Y}_{p_i'}^\lambda - \sum_{\rho} \mathcal{X}_{p_i'}^\rho \mathcal{Y}_{h_i}^\rho &= 0. \end{aligned} \quad (3.88)$$

Avec ces équations on peut maintenant inverser (3.82) et (3.83) ce qui donne

$$\begin{aligned} P_{p_i}^\dagger &= \sqrt{1 - \langle M_{p_i} \rangle} \left[\sum_{\rho} \mathcal{X}_{p_i}^\rho A_\rho^\dagger + \sum_{\lambda} \mathcal{Y}_{p_i}^\lambda R_\lambda \right], \\ P_{h_i} &= \sqrt{1 - \langle M_{h_i} \rangle} \left[\sum_{\lambda} \mathcal{X}_{h_i}^\lambda R_\lambda + \sum_{\rho} \mathcal{Y}_{h_i}^\rho A_\rho^\dagger \right]. \end{aligned} \quad (3.89)$$

Séparément pour chaque canal $K = 0$, $K = \pm \frac{\pi}{3}$ ou $K = \pm \frac{2\pi}{3}$, les éléments de matrice pp -RPA sont de la forme:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{p_i p_j} &= \left\langle \left[\overline{P}_{p_i}^-, [\mathcal{H}', \overline{P}_{p_j}^+] \right] \right\rangle \\ &= \delta_{i,j} \left(\epsilon_{p_i} - G \frac{2 \langle \sum_l (P_{h_l}^- + P_{h_l}^-) P_{p_i}^- \rangle + \langle (1 - M_{p_i}) \sum_l M_{h_l} \rangle}{1 - \langle M_{p_i} \rangle} \right) \\ &\quad + G \frac{\langle (1 - M_{p_i}) (1 - M_{p_j}) \rangle}{\sqrt{(1 - \langle M_{p_i} \rangle) (1 - \langle M_{p_j} \rangle)}} \\ \mathcal{B}_{p_i p_j} &= - \left\langle \left[\overline{P}_{p_i}^-, [\mathcal{H}', \overline{P}_{h_j}^-] \right] \right\rangle = G \frac{\langle (1 - M_{p_i}) (1 - M_{h_j}) \rangle - 2 \langle P_{p_i}^- P_{h_j}^- \rangle}{\sqrt{(1 - \langle M_{p_i} \rangle) (1 - \langle M_{h_j} \rangle)}} \end{aligned} \quad (3.90)$$

Pour le calcul de ces derniers, on donne les valeurs moyennes dans l'état RPA des produits d'opérateurs suivants

$$\begin{aligned}\langle P_{p_i}^\dagger P_{p_{i'}} \rangle &= \sqrt{(1 - \langle M_{p_i} \rangle)(1 - \langle M_{p_{i'}} \rangle)} \sum_{\lambda} \mathcal{Y}_{p_i}^{\lambda} \mathcal{Y}_{p_{i'}}^{\lambda}, \\ \langle P_{h_i}^\dagger P_{h_{i'}} \rangle &= \sqrt{(1 - \langle M_{h_i} \rangle)(1 - \langle M_{h_{i'}} \rangle)} \sum_{\rho} \mathcal{Y}_{h_i}^{\rho} \mathcal{Y}_{h_{i'}}^{\rho}, \\ \langle P_{h_i} P_{p_{i'}} \rangle &= \langle P_{p_{i'}}^\dagger P_{h_i}^\dagger \rangle = \sqrt{(1 - \langle M_{h_i} \rangle)(1 - \langle M_{p_{i'}} \rangle)} \sum_{\lambda} \mathcal{Y}_{p_{i'}}^{\lambda} \mathcal{X}_{h_i}^{\lambda}.\end{aligned}\quad (3.91)$$

En plus, on a pour une algèbre $SU2$ et pour des particules de spin- $\frac{1}{2}$, la relation de Casimir (voir aussi Chap.2)

$$\frac{1}{2} \left(P_i^- P_i^+ + P_i^+ P_i^- \right) + \left(P_i^0 \right)^2 = (\mathbf{P}_i)^2 \quad (3.92)$$

qui entraîne la relation (on fait pas la différence entre indice de particule et de trou)

$$P_i^- P_i^+ + P_i^+ P_i^- = 1 \quad (3.93)$$

car $(P_i^0)^2 = \frac{1}{4}$ et $(\mathbf{P}_i)^2 = \frac{3}{4}$. Pour les quantités $\langle M_i \rangle$, ceci donne pour les nombres d'occupation

$$\begin{aligned}M_i &= 2 P_i^+ P_i^- \\ \langle M_i \rangle &= \frac{2 \sum_{\nu} (\mathcal{Y}_i^{\nu})^2}{1 + 2 \sum_{\nu} (\mathcal{Y}_i^{\nu})^2}.\end{aligned}\quad (3.94)$$

Dans le but de fermer le système d'équations SCRPA, on doit exprimer les fonctions de corrélations de type $\langle M_i M_j \rangle$ en fonction des amplitudes RPA. Tout d'abord, on a une relation exacte si $i = j$

$$M_i M_i = 2 M_i, \quad (3.95)$$

alors il est aussi simple de montrer que pour $i \neq j$

$$\begin{aligned}M_{p_i} M_{p_j} &= 4 P_{p_i}^\dagger P_{p_j}^\dagger P_{p_j} P_{p_i}, \\ M_{p_i} M_{h_j} &= M_{p_i} + M_{h_j} - 2 P_{p_i}^\dagger P_{h_j} P_{h_j}^\dagger P_{p_i} - 2 P_{h_j}^\dagger P_{p_i} P_{p_i}^\dagger P_{h_j}, \\ M_{h_i} M_{h_j} &= 4 P_{h_i}^\dagger P_{h_j}^\dagger P_{h_j} P_{h_i}.\end{aligned}\quad (3.96)$$

ce qui nous donne l'équation aux valeurs moyennes dans l'état RPA

$$\begin{aligned}\langle M_{p_i} M_{p_j} \rangle &= 4(1 - \langle M_{p_i} \rangle)(1 - \langle M_{p_j} \rangle) \sum_{\lambda_0 \lambda_3} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \mathcal{Y}_{p_i}^{\lambda_0} \mathcal{Y}_{p_i}^{\lambda_3} \mathcal{Y}_{p_j}^{\lambda_1} \mathcal{Y}_{p_j}^{\lambda_2} \langle R_{\lambda_0} R_{\lambda_1} R_{\lambda_2}^\dagger R_{\lambda_3}^\dagger \rangle, \\ \langle M_{p_i} M_{h_j} \rangle &= \langle M_{p_i} \rangle + \langle M_{h_j} \rangle \\ &\quad - 2(1 - \langle M_{p_i} \rangle)(1 - \langle M_{h_j} \rangle) \sum_{\lambda_0 \lambda_3} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \mathcal{Y}_{p_i}^{\lambda_0} \mathcal{Y}_{p_i}^{\lambda_3} \mathcal{X}_{h_j}^{\lambda_1} \mathcal{X}_{h_j}^{\lambda_2} \langle R_{\lambda_0} R_{\lambda_1} R_{\lambda_2}^\dagger R_{\lambda_3}^\dagger \rangle \\ &\quad - 2(1 - \langle M_{p_i} \rangle)(1 - \langle M_{h_j} \rangle) \sum_{\rho_0 \rho_3} \sum_{\rho_1 \rho_2} \mathcal{Y}_{h_j}^{\rho_0} \mathcal{Y}_{h_j}^{\rho_3} \mathcal{X}_{p_i}^{\rho_1} \mathcal{X}_{p_i}^{\rho_2} \langle A_{\rho_0} A_{\rho_1} A_{\rho_2}^\dagger A_{\rho_3}^\dagger \rangle, \\ \langle M_{h_i} M_{h_j} \rangle &= 4(1 - \langle M_{h_i} \rangle)(1 - \langle M_{h_j} \rangle) \sum_{\rho_0 \rho_3} \sum_{\rho_1 \rho_2} \mathcal{Y}_{h_i}^{\rho_0} \mathcal{Y}_{h_i}^{\rho_3} \mathcal{Y}_{h_j}^{\rho_1} \mathcal{Y}_{h_j}^{\rho_2} \langle A_{\rho_0} A_{\rho_1} A_{\rho_2}^\dagger A_{\rho_3}^\dagger \rangle.\end{aligned}\quad (3.97)$$

et enfin pour le calcul de ces fonctions de corrélations à droite dans (3.97), on donne le détail dans l'annexe (A.2). On voit bien qu'on a un système d'équations non-linéaire self consistant fermé pour les amplitudes \mathcal{X} et \mathcal{Y} qu'on peut résoudre numériquement par itération.

En plus, on peut exprimer l'énergie fondamentale pp -SCRPA, $E_{SCRPA} = \langle RPA|H|RPA \rangle$, en fonction des amplitudes RPA,

$$\begin{aligned}
E_{SCRPA} = & E_{HF} - \epsilon_1 \langle M_{h_1} \rangle - \epsilon_2 \langle M_{h_2} \rangle - \epsilon_3 \langle M_{h_3} \rangle + \epsilon_4 \langle M_{p_4} \rangle + \epsilon_5 \langle M_{p_5} \rangle + \epsilon_6 \langle M_{p_6} \rangle \\
& - G \left\{ \langle (\tilde{n}_{6\uparrow} + \tilde{n}_{5\uparrow} + \tilde{n}_{4\uparrow}) (\tilde{n}_{1\uparrow} + \tilde{n}_{2\uparrow} + \tilde{n}_{3\uparrow}) \rangle + \uparrow \leftrightarrow \downarrow \right\} \\
& + G \sum_{i,j=1}^3 \langle (P_{p_i}^+ P_{p_j}^- + P_{h_i}^+ P_{h_j}^-) \rangle + G \sum_{i,j=1}^3 \langle (P_{h_i}^- P_{p_j}^- + cc) \rangle \\
& + G \sum_{i,j=4}^5 \langle (P_{p_i}^+ P_{p_j}^- + P_{h_i}^+ P_{h_j}^-) \rangle + G \sum_{i=4}^5 \langle (P_{h_i}^- P_{p_i}^- + cc) \rangle \\
& + G \sum_{i,j=6}^7 \langle (P_{p_i}^+ P_{p_j}^- + P_{h_i}^+ P_{h_j}^-) \rangle + G \sum_{i=6}^7 \langle (P_{h_i}^- P_{p_i}^- + cc) \rangle \\
& + G \langle (P_{p_8}^+ P_{p_8}^- + P_{h_8}^+ P_{h_8}^-) \rangle + G \langle (P_{h_8}^- P_{p_8}^- + cc) \rangle \\
& + G \langle (P_{p_9}^+ P_{p_9}^- + P_{h_9}^+ P_{h_9}^-) \rangle + G \langle (P_{h_9}^- P_{p_9}^- + cc) \rangle , \tag{3.98}
\end{aligned}$$

Pour le calcul des valeurs moyennes de densités de quasiparticules dans l'état RPA, $\langle \tilde{n}_{i\sigma} \rangle$ et $\langle \tilde{n}_{i\sigma} \tilde{n}_{j\sigma} \rangle$, on procède de la même manière que dans le paragraphe (3.2.1). Pour $\sigma = \sigma'$, on a $\sum_{i,\sigma}^3 \langle \tilde{n}_{p_i\sigma} \tilde{n}_{h_i\sigma} \rangle = 0$. On voit que, contrairement au cas ph où on était "obligé" à négliger les termes en " S ", ici avec la pp -RPA nous n'avons aucune entrave au formalisme. Ceci va se faire sentir au niveau des règles de somme comme on va voir plus loin.

3.6.2 pp -RPA standard

Tout d'abord, on commence par l'application de la pp -RPA standard, en utilisant l'approximation quasi-boson (en remplaçant l'état RPA par celui de HF). On remarque que le vecteur d'onde total de l'excitation de deux particules ou deux trous, $K = k_{i\uparrow} + k_{j\downarrow}$, est un bon nombre quantique. Dans ce cas, les matrices pp -RPA sont données pour chaque K par

Pour $K = 0$:

Dans ce canal, les opérateurs d'addition et de retranchement de 2-particules sont

$$A_\rho^\dagger = \sum_{i=1}^3 \mathcal{X}_{p_i}^\rho \bar{P}_{p_i}^\dagger - \mathcal{Y}_{h_i}^\rho \bar{P}_{h_i} , \quad R_\lambda^\dagger = \sum_{i=1}^3 \mathcal{X}_{h_i}^\lambda \bar{P}_{h_i}^\dagger - \mathcal{Y}_{p_i}^\lambda \bar{P}_{p_i} , \tag{3.99}$$

Ainsi, les matrices RPA standard sont

$$\mathcal{A}_0 = \begin{pmatrix} 4t + G & G & G \\ G & 2t + G & G \\ G & G & 2t + G \end{pmatrix}, \quad \mathcal{B}_0 = \begin{pmatrix} G & G & G \\ G & G & G \\ G & G & G \end{pmatrix}. \quad (3.100)$$

Ce qui donne les valeurs propres

$$\Omega_1 = 2t, \quad \Omega_2 = t \sqrt{10 + 8\frac{G}{t} - 2\sqrt{9 + \frac{16G}{t}}}, \quad \Omega_3 = t \sqrt{10 + 8\frac{G}{t} + 2\sqrt{9 + \frac{16G}{t}}}. \quad (3.101)$$

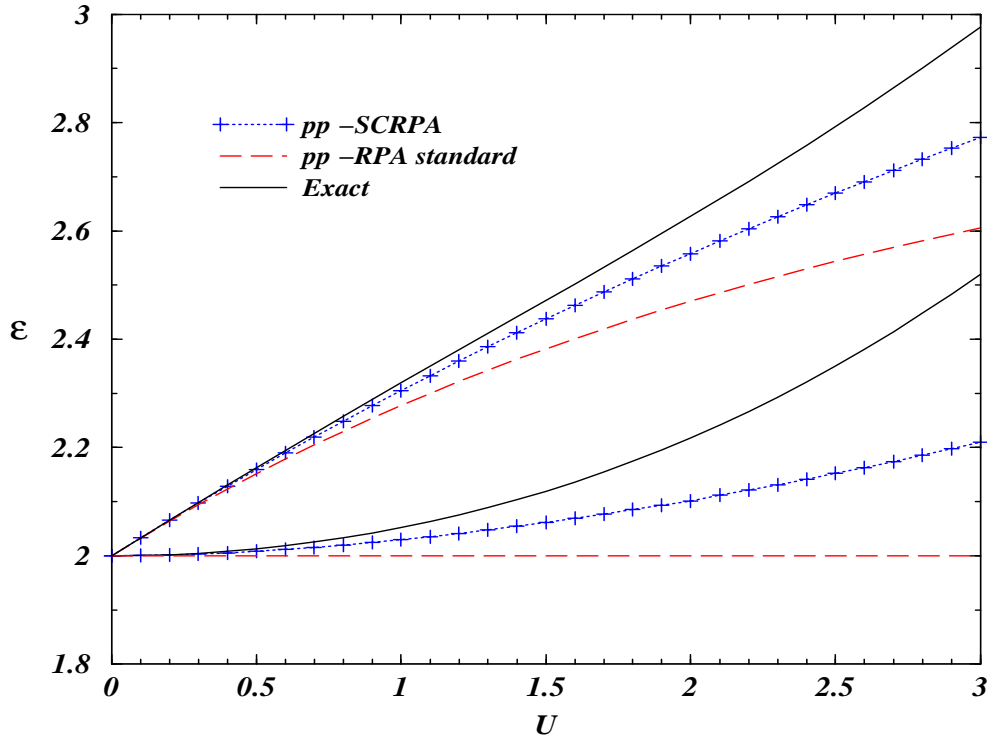


FIG. 3.10 – Spectre d'excitation *pp*-RPA standard (trait tiré), *pp*-SCRPA (croix) et exact (trait plein) du système à 6-sites demi-pleins avec la projection de spin $m_s = 0$ et un vecteur d'onde total $K = 0$.

Pour $K = +\frac{\pi}{3}$ ou $K = -\frac{\pi}{3}$:

Pour $K = +\frac{\pi}{3}$, les opérateurs d'addition et de retranchement sont donnés respectivement par

$$A_\rho^\dagger = \sum_{i=4}^5 \mathcal{X}_{p_i}^\rho \bar{P}_{p_i}^\dagger - \mathcal{Y}_{h_i}^\rho \bar{P}_{h_i} , \quad R_\lambda^\dagger = \sum_{i=4}^5 \mathcal{X}_{h_i}^\lambda \bar{P}_{h_i}^\dagger - \mathcal{Y}_{p_i}^\lambda \bar{P}_{p_i} , \quad (3.102)$$

et pour $K = -\frac{\pi}{3}$

$$A_\rho^\dagger = \sum_{i=6}^7 \mathcal{X}_{p_i}^\rho \bar{P}_{p_i}^\dagger - \mathcal{Y}_{h_i}^\rho \bar{P}_{h_i} , \quad R_\lambda^\dagger = \sum_{i=6}^7 \mathcal{X}_{h_i}^\lambda \bar{P}_{h_i}^\dagger - \mathcal{Y}_{p_i}^\lambda \bar{P}_{p_i} , \quad (3.103)$$

Cependant, les matrices RPA standard pour les deux canaux qui sont dégénérés,

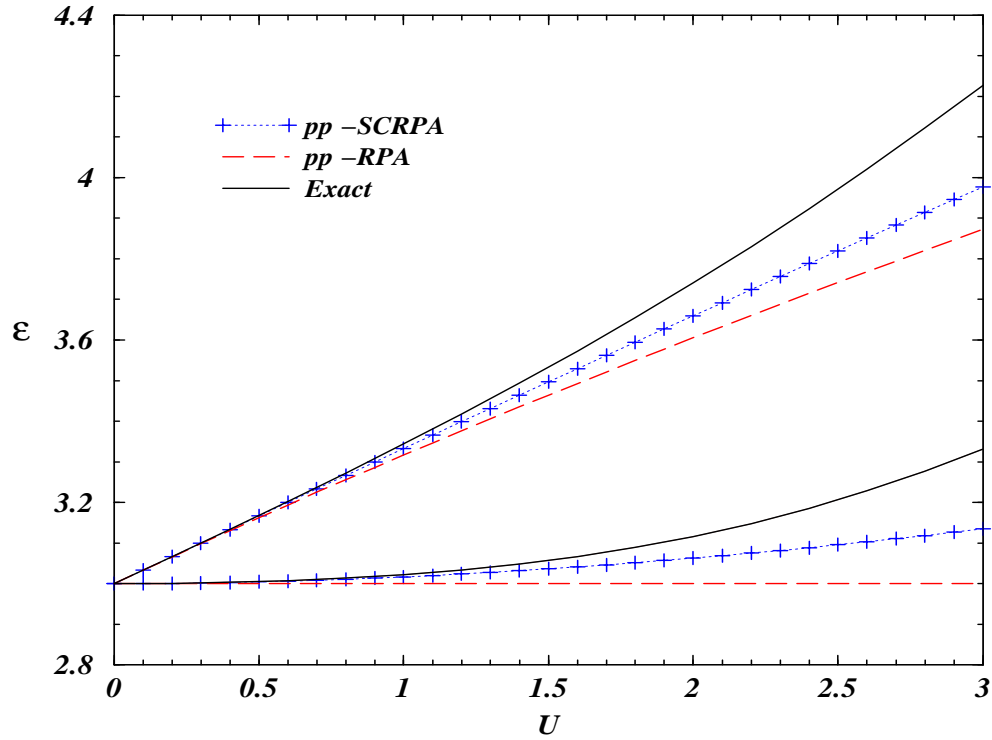


FIG. 3.11 – Spectre d'excitation pp -RPA standard (trait tiré), pp -SCRPA (les croix) et exact (trait plein) du système à 6-sites demi-pleins avec la projection de spin $m_s = 0$ et un vecteur d'onde total $K = \pm\frac{\pi}{3}$.

$$\mathcal{A}_{\pm\frac{\pi}{3}} = \begin{pmatrix} 3t + G & G \\ G & 3t + G \end{pmatrix} , \quad \mathcal{B}_{\pm\frac{\pi}{3}} = \begin{pmatrix} G & G \\ G & G \end{pmatrix} , \quad (3.104)$$

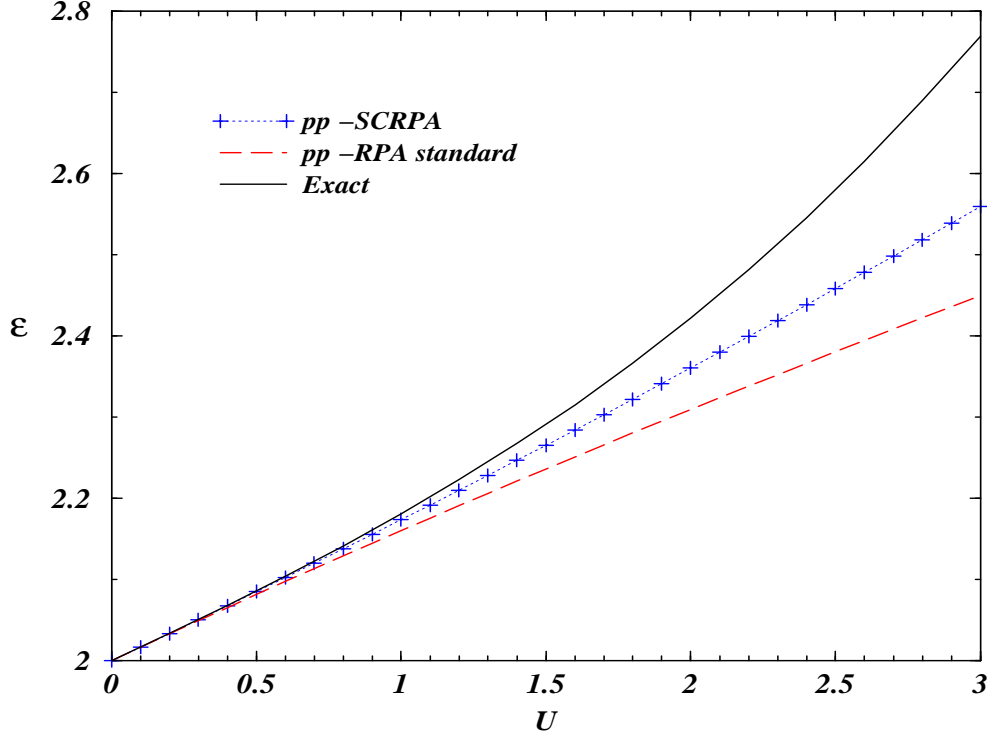


FIG. 3.12 – Spectre d'excitation *pp*-RPA standard (trait tiré), *pp*-SCRPA (croix) et exact (trait plein) du système à 6-sites demi-pleins avec la projection de spin $m_s = 0$ et un vecteur d'onde total $K = \pm \frac{2\pi}{3}$.

ce qui donne les valeurs propres doublement dégénérée,

$$\Omega_4 = 3t, \quad \Omega_5 = 3t \sqrt{1 + \frac{4G}{3t}}. \quad (3.105)$$

Pour $K = +\frac{2\pi}{3}$ ou $K = -\frac{2\pi}{3}$:

Pour $K = +\frac{2\pi}{3}$, les opérateurs d'addition et de retranchement sont donnés respectivement par

$$A_\rho^\dagger = \mathcal{X}_{p_8}^\rho \overline{P}_{p_8}^\dagger - \mathcal{Y}_{h_8}^\rho \overline{P}_{h_8}, \quad R_\lambda^\dagger = \mathcal{X}_{h_8}^\lambda \overline{P}_{h_8}^\dagger - \mathcal{Y}_{p_8}^\lambda \overline{P}_{p_8}, \quad (3.106)$$

et pour $K = -\frac{2\pi}{3}$

$$A_\rho^\dagger = \mathcal{X}_{p_9}^\rho \overline{P}_{p_9}^\dagger - \mathcal{Y}_{h_9}^\rho \overline{P}_{h_9}, \quad R_\lambda^\dagger = \mathcal{X}_{h_9}^\lambda \overline{P}_{h_9}^\dagger - \mathcal{Y}_{p_9}^\lambda \overline{P}_{p_9}, \quad (3.107)$$

$$\mathcal{A}_{\pm \frac{2\pi}{3}} = 2t + G, \quad \mathcal{B}_{\pm \frac{2\pi}{3}} = G, \quad (3.108)$$

ce qui donne la valeur propre doublement dégénérée,

$$\Omega_6 = 2t \sqrt{1 + \frac{G}{t}}. \quad (3.109)$$

Avant de comparer ces résultats avec la solution exacte, nous allons discuter la généralisation self consistante.

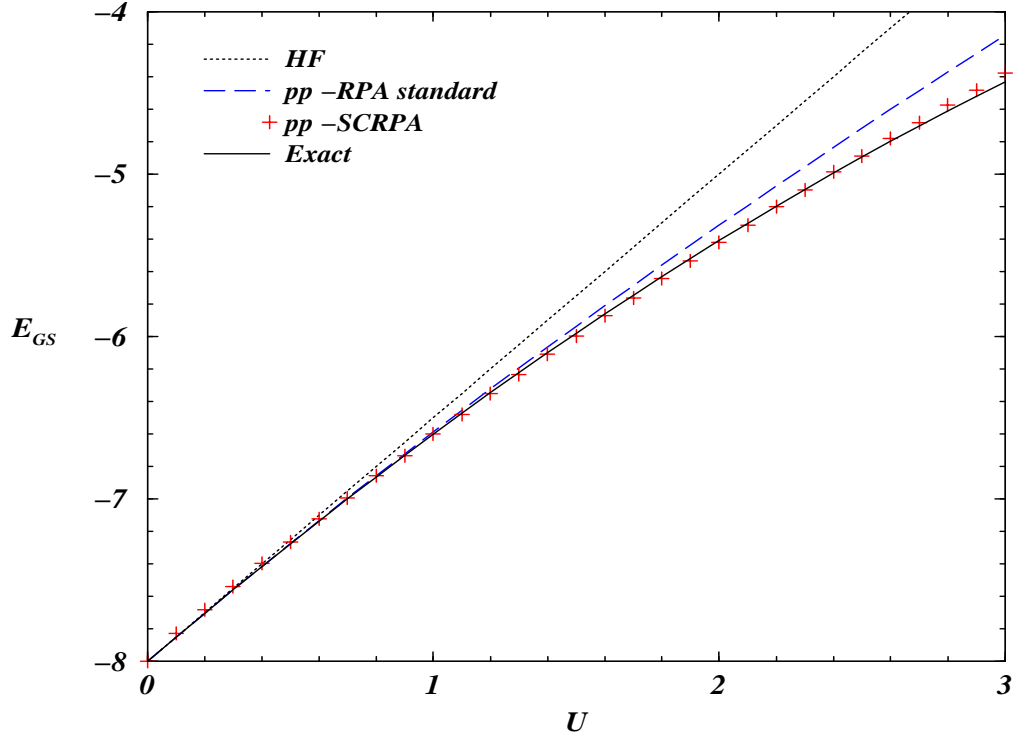


FIG. 3.13 – L'énergie de l'état fondamental HF (trait pointillé), *pp*-RPA standard (trait tiré), *pp*-SCRPA (croix) et exact (trait plein) du système à 6-sites demi-plein avec la projection de spin $m_s = 0$ dans le canal *pp*.

3.6.3 *pp*-SCRPA

De nouveau, on initialise le calcul itératif avec la solution RPA standard. On obtient les résultats présentés sur la figure (Fig.3.13) pour l'énergie fondamentale et sur les figures (Figs. 3.10, 3.11 et 3.12) pour les énergies d'excitations de différents canaux du vecteur d'onde total ($K = 0, \pm\frac{\pi}{3}, \pm\frac{2\pi}{3}$). On remarque que le spectre d'excitation de la SCRPA est fortement amélioré par rapport à celui de la RPA standard, mais pas autant que ce ne fut le cas dans le canal *ph*. Apparemment notre ansatz pour la *pp*-SCRPA n'est pas

apte à capter toutes les corrélations essentielles. Probablement, le fait que le terme \mathcal{H}_R qui contient des corrélations ph n'est pas du tout pris en compte par le présent traitement y est pour une bonne part que la SCRPA réduit l'écart entre le résultat exact et celui de la RPA standard certes par un facteur ~ 2 mais restant tout de même bien en deçà de ce à quoi nous étions habitués. En revanche, l'énergie du fondamental est à nouveau très bien reproduite (Fig.3.13).

3.7 Règle de somme pondérée par l'énergie

De même qu'avec le cas à deux sites, nous allons tester notre approche avec la règle de somme pondérée par l'énergie. Nous développons, par analogie avec le paragraphe (2.3), le calcul des deux membres de l'égalité (2.131) dans le canal particule-particule avec un opérateur de transition, F , donné par

$$F = \sum_{i(K)} (P_{p_i}^\dagger + h.c.) . \quad (3.110)$$

qui ajoute deux particules car le fondamental $|0\rangle$ correspond au système à $N+2$ -particules. Ainsi, on doit développer les deux membres de gauche et de droite de l'égalité suivante avec (3.110)

$$\sum_{\rho} (E_{\rho} - E_0) |\langle \rho | F | 0 \rangle|^2 = \frac{1}{2} \langle 0 | [F, [H, F]] | 0 \rangle \quad (3.111)$$

De même, nous calculons le membre de gauche pour chaque impulsion totale K de deux particules et en sommant toutes les contributions, nous obtenons

$$\begin{aligned} MG &\equiv \sum_{\rho(K)} (E_{\rho} - E_0) |\langle \nu | F | 0 \rangle|^2 \\ &= \sum_{\rho(K)} (E_{\rho} - E_0) |\langle 0 | A_{\rho} F | 0 \rangle|^2 \\ &= \sum_{\rho(K)} (E_{\rho} - E_0) |\langle 0 | A_{\rho} F | 0 \rangle|^2 \\ &= \sum_{\rho(K)} (E_{\rho} - E_0) |\langle 0 | [A_{\rho}, F] | 0 \rangle|^2 \\ &= \sum_{\rho(K)} (E_{\rho} - E_0) \left| \sum_{i(K)} \sqrt{1 - M_i} (\mathcal{X}_i^{\rho} + \mathcal{Y}_i^{\rho}) \right|^2 \end{aligned} \quad (3.112)$$

qui est formellement égale au résultat RPA standard apart le facteur $\sqrt{1 - M_i}$. C'est aussi un résultat analogue à celui en paragraphe (3.3) concernant la règle de somme dans le canal ph . Sauf qu'ici les amplitudes \mathcal{X}^{ρ} , \mathcal{Y}^{ρ} sont solution de la pp -SCRPA. D'autre part,

l'équation de mouvement RPA et les propriétés des amplitudes RPA dans ce canal nous permettent de réécrire (3.111) comme

$$MD \equiv \frac{1}{2} \langle 0 | [F, [H, F]] | 0 \rangle = \sum_{\rho(K)} \sqrt{1 - M_i} \sum_{i'} \sqrt{1 - M_{i'}} (\mathcal{A}_{i,i'} - \mathcal{B}_{i,i'}) . \quad (3.113)$$

Nous présentons les résultats de la règle de somme pour le cas à six sites dans le canal pp sur la figure (Fig. 3.14). On remarque bien que le membre de gauche, MG , est parfaitement égale à celui de droite, MD , pour toute valeur de U . Cette performance est due au fait, déjà mentionné plus haut, que dans le canal pp la SCRPA ne subit aucune entrave au formalisme telle que négliger des termes “ S ” comme c’était le cas dans le canal ph . Malgré tout la règle de somme n’est pas l’unique critère et on voit que les résultats pp -SCRPA sont moins bons que ceux obtenus dans le canal ph .

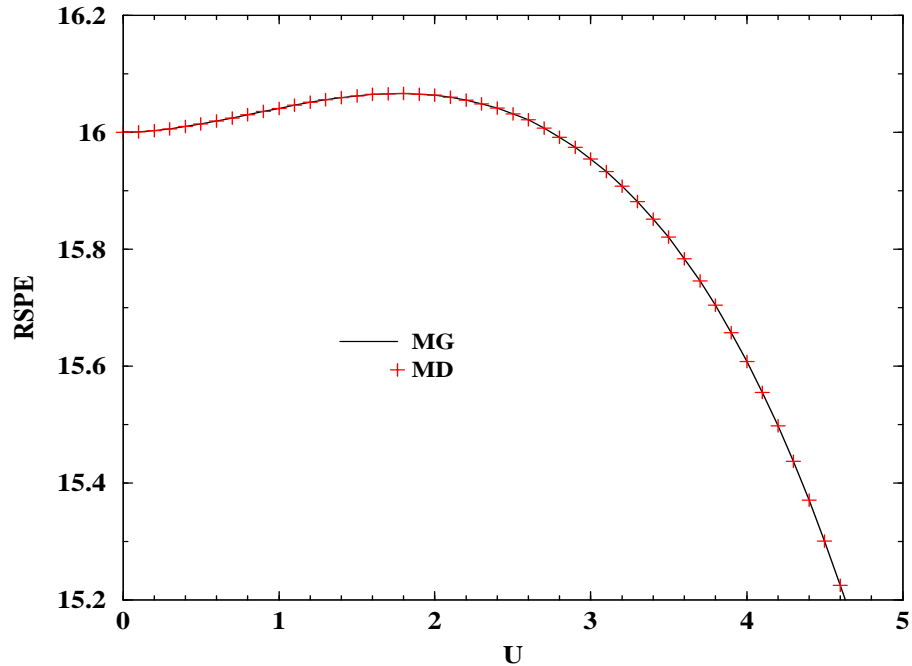


FIG. 3.14 – Règle de somme pondérée par l’énergie pour le canal particule-particule pour le cas à 6-sites. On note par MD et MG les membres de droite et de gauche de l’égalité (2.131) qui sont calculés avec la SCRPA.

3.8 Discussion et Conclusion

Ce chapitre concernant la chaîne de Hubbard à six sites demi-pleine est au cœur de ce travail de thèse. Ce n’est plus un cas quelque peu trivial comme celui de deux sites

et ce n'est pas non plus un cas avec des dégénérescences qui posent problème comme on va le voir pour le cas à quatre sites dans le prochain chapitre. En fait les six sites constituent le premier des cas à $2 + 4n$ ($n = 1, 2, \dots$) sites qui est non trivial et où on peut supposer que si celui-ci est maîtrisé, alors tous les autres avec $n > 1$ donneront des résultats similaires (voir par exemple l'expérience de ce type avec le modèle de Richardson dans le chapitre 1). Nous avons vu que pour les six sites dans le canal particule-trou (ph) la SCRPA donne d'excellents résultats en très bon accord avec la solution exacte. Ceci est particulièrement vrai pour les nombres d'occupations qui constituent un test très fort pour la fonction d'onde du fondamental sousjaçant. Ceci confirme les très bonnes performances de la SCRPA déjà obtenus sur d'autres modèles [22] ainsi que l'espérance que nous avons mise dans la méthode en constatant qu'elle donnait la solution exacte dans le cas à deux sites. Nous avons ici travaillé exclusivement dans la base des ondes planes, une restriction que nous nous sommes imposée pour des raisons expliquées dans le texte principal. De ce fait nous n'avons pas pu appliquer la SCRPA pour toute valeur de U et nous étions limités à des valeurs de U couvrant un domaine essentiellement donné par l'apparition d'une brisure de symétrie en HF, mais allant dans la plupart des cas quand même 20% à 30%, voir 50% au delà du point de l'instabilité HF. La limitation en U venait du fait que la résolution des équations SCRPA par itération ne convergeait plus très bien et se faisait également sentir une dégradation des résultats qui dans le domaine de bonne convergence étaient, comme on l'a déjà dit, excellents. Au fait les résultats SCRPA, contrairement à ceux de la RPA standard, ne montrent, en accord avec la solution exacte, aucun signe d'instabilité. Pour un système de seulement 6-électrons, ceci n'a rien de surprenant mais démontre la capacité de la SCRPA d'incorporer correctement les fluctuations quantiques.

Notons ici aussi encore une fois que nous avons restreint l'espace des configurations de la SCRPA aux composantes ph et hp , exactement comme c'est aussi le cas dans la RPA standard. Cependant, en s-RPA c'est une conséquence stricte de l'approximation, tandis que en SCRPA en vue du fait que les membres d'occupations $n_k \neq 0, 1$ il n'y aurait pas de raison, à priori, de ne pas inclure aussi des configurations pp' ou hh' ($a_p^\dagger a_{p'}$ ou $a_h^\dagger a_{h'}$). Cela a été fait sur d'autres modèles [53]. Ici par contre, cela a engendré des difficultés numériques et nous avons laissé tomber ces configurations "anormaux" avec pour conséquence que la f -sum rule est très légèrement violée, démontrant par ailleurs de la faible importance de ces configurations. Nous n'excluons pas qu'il peut y exister un algorithme numérique qui puisse résoudre ce problème, mais en vu de la très faible influence de ces termes en pp' (hh') nous n'avons pas cherché plus loin. Une deuxième petite corrections 'ad hoc' au formalisme à laquelle nous avons dû procéder sans risquer une détérioration de nos résultats était de limiter la self-consistance à l'intérieur de chaque canal (en principe, via les termes

non linéaires, différentes voies en transfert $|q|$ peuvent être couplées indirectement). Des raisons pour faire ceci ont été évoquées dans le texte principal. Nous voyons donc que, contrairement à ce qui s'est passé pour le modèle d'appariement multicouches (Chap.1) et la chaîne à deux sites, dans le cas général à multiples sites il faut faire une légère adaptation 'à la main' au formalisme. Une généralisation future en incluant les configurations $2p - 2h$ pourra peut être éviter ceci ainsi que de permettre la description de la phase avec symétrie brisée.

Comme pour le cas à deux sites, l'application de la SCRPA dans le canal particule-particule (resommations des échelles) a aussi produit le résultat exact, nous avons voulu savoir si cette approche allait être également performante dans le cas à 6-sites. A priori, en vue de la forme de l'interaction, on ne s'attendrait pas à ce que l'Hamiltonien de Hubbard engendre de manière prédominante, ou même égale aux ph , des corrélations du type pp . Nous n'étions donc pas surpris que les résultats dans ce canal étaient moins bons que ceux dans la voie ph . Néanmoins même la pp -SCRPA a encore systématiquement réduit l'écart entre la s-RPA et la solution exacte de moitié.

Chapitre 4

Modèle de Hubbard à 4-sites dans la base des ondes planes

Le modèle de Hubbard à un nombre de site $N = 4n$, où n est un entier, a un spectre d'excitation à $U = 0$ assez particulier. Cela provient du fait que la couche supérieure est partiellement remplie (voir Fig.4.1). On remarque que la couche supérieure est doublement

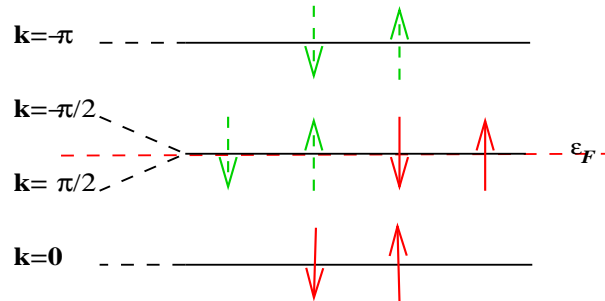


FIG. 4.1 – *Spectre d'excitation HF à $U = 0$ pour la chaîne à 4-sites demi-pleine avec la projection de spin $m_s = 0$. Les états occupés sont représentés par les flèches pleines et ceux non-occupés sont représentés par les flèches trait-tiré.*

dégénérée (Fig.4.1). Pour chaque orientation de spin, elle est remplie seulement par une particule de spin σ or il y a de la place pour deux. Cette dégénérescence produit une excitation d'énergie zéro au niveau des approximations champ moyen (HF) et au niveau de la RPA standard. Ceci entraîne, comme nous allons le voir dans le chapitre (Chap.5), une instabilité vers un état avec aimantation antiferromagnétique non nulle dès que $U \neq 0$. Donc, pour initialiser le calcul itératif, nous nous retrouvons avec un problème numérique du fait que les amplitudes RPA, \mathcal{X}, \mathcal{Y} correspondantes à ce mode zéro sont infinies. En

revanche, le canal $m_s = \pm 1$ présente une couche supérieure totalement remplie du fait que les deux particules sont toutes les deux de spin- \uparrow (pour $m_s = +1$) ou de spin- \downarrow (pour $m_s = -1$) (voir Fig.4.2). Ainsi, nous commençons avec le cas demi-plein et avec une projection de spin $m_s = \pm 1$ qui lui ne pose pas de problème et ensuite nous discuterons le cas $m_s = 0$. Présentons d'abord le spectre d'excitation des quasiparticules HF.

4.1 Approximation Hartree–Fock

Comme auparavant pour le cas à deux- et six-sites, on applique une transformation HF qui conserve la symétrie de translation, c'est à dire les densités des différents sites restent uniformes jusqu'à une valeur critique de U . Pour cela, on utilise la même transformation qu'en (3.1). Dans le cas à 4-sites demi-plein, l'expression de l'hamiltonien en fonction des $a_{k\sigma}^\dagger$ et $a_{k\sigma}$ est donnée par

$$\begin{aligned}
 H = & -2t \sum_{\sigma} \hat{n}_{1\sigma} - \hat{n}_{4\sigma} + \frac{U}{4} \sum_k \hat{n}_{k\uparrow} \sum_{k'} \hat{n}_{k'\downarrow} \\
 & + \frac{U}{4} [(L_{1\uparrow,4\uparrow} + L_{2\uparrow,3\uparrow}) + cc] [(L_{1\downarrow,4\downarrow} + L_{2\downarrow,3\downarrow}) + cc] \\
 & + \frac{U}{4} \left\{ \left\{ (L_{1\uparrow,2\uparrow} + L_{2\uparrow,4\uparrow} + L_{3\uparrow,1\uparrow} + L_{4\uparrow,3\uparrow}) \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. \cdot (L_{1\downarrow,2\downarrow} + L_{2\downarrow,4\downarrow} + L_{3\downarrow,1\downarrow} + L_{4\downarrow,3\downarrow}) \right\} + cc \right\}, \tag{4.1}
 \end{aligned}$$

avec $L_{k\sigma,k'\sigma} = a_{k\sigma}^\dagger a_{k'\sigma}$ avec $k \neq k'$ et $\hat{n}_{k\sigma} = a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma}$.

Discussion du cas $U = 0$:

On a les états possibles avec les vecteurs d'ondes

$$k_1 = 0, \quad k_2 = \frac{\pi}{2}, \quad k_3 = -\frac{\pi}{2}, \quad k_4 = -\pi$$

et les énergies correspondantes, $\epsilon_k = -2t \cos(k)$,

$$\epsilon_{k_1} = -2t, \quad \epsilon_{k_2} = 0, \quad \epsilon_{k_3} = 0, \quad \epsilon_{k_4} = 2t,$$

respectivement. Ainsi, la matrice de transformation est donnée par

$$\begin{pmatrix} c_{1,\sigma} \\ c_{2,\sigma} \\ c_{3,\sigma} \\ c_{4,\sigma} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -i & i & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & i & -i & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{1,\sigma} \\ a_{2,\sigma} \\ a_{3,\sigma} \\ a_{4,\sigma} \end{pmatrix}. \tag{4.2}$$

On construit un état HF qui correspond à l'énergie HF minimale et une impulsion totale nulle. Ces états sont

$$|HF1\rangle = a_{1,\uparrow}^\dagger a_{1,\downarrow}^\dagger a_{2,\uparrow}^\dagger a_{3,\downarrow}^\dagger |-\rangle, \quad (4.3)$$

$$|HF2\rangle = a_{1,\uparrow}^\dagger a_{1,\downarrow}^\dagger a_{2,\downarrow}^\dagger a_{3,\uparrow}^\dagger |-\rangle, \quad (4.4)$$

$$|HF3\rangle = a_{1,\uparrow}^\dagger a_{1,\downarrow}^\dagger a_{2,\downarrow}^\dagger a_{3,\downarrow}^\dagger |-\rangle, \quad (4.5)$$

$$|HF4\rangle = a_{1,\uparrow}^\dagger a_{1,\downarrow}^\dagger a_{2,\uparrow}^\dagger a_{3,\uparrow}^\dagger |-\rangle. \quad (4.6)$$

L'énergie du fondamental HF qui correspond à ces états est donnée par $E_{HF} = -4t$.

Discussion du cas $U \neq 0$:

On suppose que la transformation (4.2) reste valable jusqu'à une valeur critique U_c . Les énergies des états fondamentaux HF sont données par $E_{HF} = -4t + U$ pour les états (4.3) et (4.4) ($m_s = 0$) et $E_{HF} = -4t + \frac{3U}{4}$ pour les états (4.5) et (4.6) ($m_s = \pm 1$). Egalement, les énergies à une particule, ϵ_{k_i} , dépendent linéairement de U . Comme nous allons le voir, les ϵ_{k_i} du canal $m_s = 0$ sont différentes de celles du canal $m_s = \pm 1$.

4.2 Chaîne demi-pleine avec la projection du spin $m_s = \pm 1$

Comme déjà mentionné, le cas $m_s = 0$ posera problème, et nous traitons donc d'abord la projection $m_s = \pm 1$. Ainsi, l'énergie des états fondamentaux HF (4.5 et 4.6) avec la projection de spin $m_s = \pm 1$ est donnée par $E_{HF} = -4t + \frac{3U}{4}$. Pour définir le spectre HF, il faut qu'on choisisse l'un des déterminants de Slater (4.5) ou (4.6). Dans notre cas, on choisit celui de l'équation (4.5). Ainsi, les valeurs moyennes dans cet état des différents termes de densité sont

$$\langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle = \frac{1}{4}, \quad \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle = \frac{3}{4}, \quad \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i+1\uparrow} \rangle = \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i+1\downarrow} \rangle = \frac{1}{4}.$$

4.2.1 Hamiltonien de quasiparticules

Comme dans les chapitres précédents, on définit les opérateurs $b_{k,\sigma}$ de telle sorte que l'action d'un destructeur sur l'état HF donne zéro,

$$\begin{pmatrix} a_{1,\uparrow} \\ a_{1,\downarrow} \\ a_{2,\downarrow} \\ a_{3,\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{1,\downarrow}^\dagger \\ b_{1,\uparrow}^\dagger \\ b_{2,\downarrow}^\dagger \\ b_{3,\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} a_{2,\uparrow} \\ a_{3,\uparrow} \\ a_{4,\uparrow} \\ a_{4,\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{2,\uparrow} \\ b_{3,\uparrow} \\ b_{4,\downarrow} \\ b_{4,\uparrow} \end{pmatrix}. \quad (4.7)$$

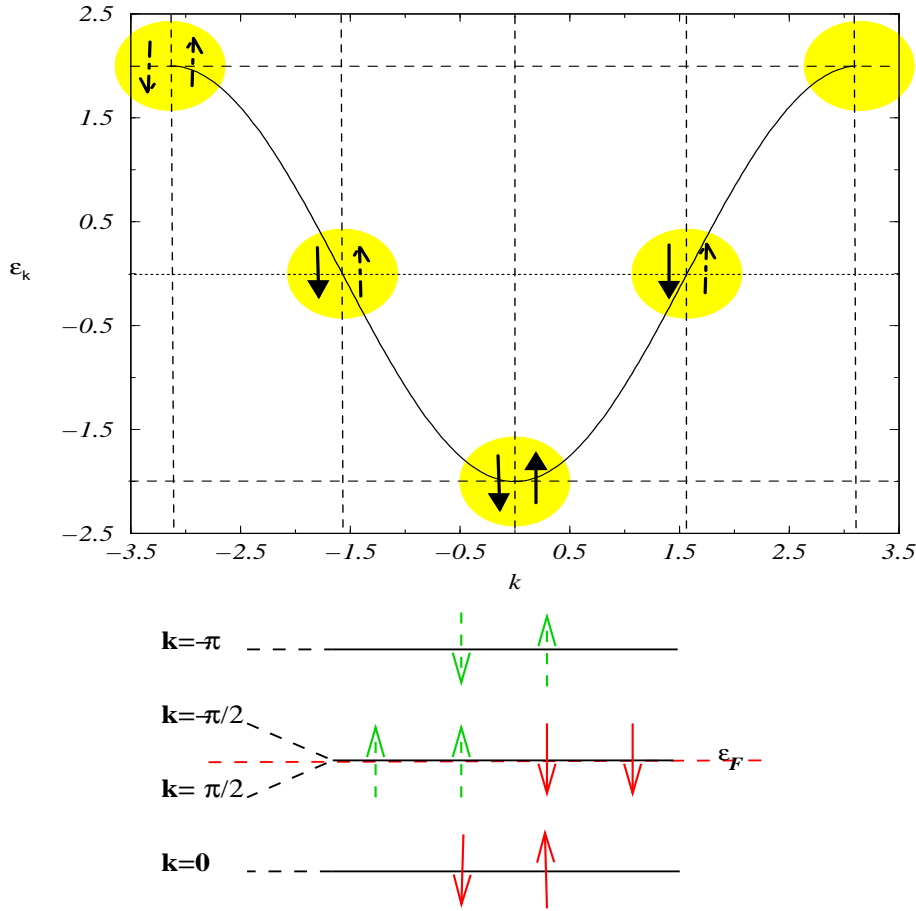


FIG. 4.2 – *Spectre d'excitation HF à $U = 0$ pour la chaîne à 4-sites demi-pleine avec la projection de spin $m_s = -1$. Les états occupés sont représentés par les flèches pleines et ceux non-occupés sont représentés par les flèches trait-tiré.*

Ainsi, l'hamiltonien se transforme comme

$$H = H_{HF} + H_{int} \quad (4.8)$$

$$H_{HF} = E_{HF} - \epsilon_{1\downarrow} \tilde{n}_{1\downarrow} - \epsilon_{1\uparrow} \tilde{n}_{1\uparrow} - \epsilon_{2\downarrow} \tilde{n}_{2\downarrow} - \epsilon_{3\downarrow} \tilde{n}_{3\downarrow} + \epsilon_{2\uparrow} \tilde{n}_{2\uparrow} + \epsilon_{3\uparrow} \tilde{n}_{3\uparrow} + \epsilon_{4\downarrow} \tilde{n}_{4\downarrow} + \epsilon_{4\uparrow} \tilde{n}_{4\uparrow} ,$$

$$H_{int} = \frac{U}{4} \left\{ \begin{aligned} & (J_{1\uparrow,4\uparrow}^- + J_{4\uparrow,1\uparrow}^+)(J_{1\downarrow,4\downarrow}^- + J_{4\downarrow,1\downarrow}^+) + (J_{1\uparrow,2\uparrow}^- + J_{3\uparrow,1\uparrow}^+)(J_{3\downarrow,4\downarrow}^- + J_{4\downarrow,2\downarrow}^+) \\ & + (J_{2\uparrow,1\uparrow}^+ + J_{1\uparrow,3\uparrow}^-)(J_{4\downarrow,3\downarrow}^+ + J_{2\downarrow,4\downarrow}^-) - (J_{1\uparrow,4\uparrow}^- + J_{4\uparrow,1\uparrow}^+)(S_{2\downarrow,3\downarrow}^- + S_{3\downarrow,2\downarrow}^+) \\ & - (S_{2\uparrow,3\uparrow}^- + S_{3\uparrow,2\uparrow}^-)(J_{1\downarrow,4\downarrow}^- + J_{4\downarrow,1\downarrow}^+) - (J_{1\uparrow,2\uparrow}^- + J_{3\uparrow,1\uparrow}^+)(S_{1\downarrow,2\downarrow}^- + S_{3\downarrow,1\downarrow}^+) \\ & - (S_{2\uparrow,4\uparrow}^- + S_{4\uparrow,2\uparrow}^+)(J_{3\downarrow,4\downarrow}^- + J_{4\downarrow,2\downarrow}^+) - (J_{2\uparrow,1\uparrow}^+ + J_{1\uparrow,3\uparrow}^-)(S_{2\downarrow,1\downarrow}^+ + S_{1\downarrow,3\downarrow}^-) \end{aligned} \right.$$

$$\begin{aligned}
& -(S_{4\uparrow,2\uparrow}^+ + S_{3\uparrow,4\uparrow}^-)(J_{4\downarrow,3\downarrow}^+ + J_{2\downarrow,4\downarrow}^-) - \left\{ \left\{ J_{2\uparrow,2\downarrow}^+ J_{3\downarrow,3\uparrow}^- + J_{3\uparrow,2\downarrow}^+ J_{3\downarrow,2\uparrow}^- \right. \right. \\
& \left. \left. + J_{2\uparrow,1\downarrow}^+ J_{2\downarrow,4\uparrow}^- + J_{2\uparrow,3\downarrow}^+ J_{1\downarrow,4\uparrow}^- + J_{4\uparrow,1\downarrow}^+ J_{2\downarrow,3\uparrow}^- + J_{4\uparrow,3\downarrow}^+ J_{1\downarrow,3\uparrow}^- \right\} + cc \right\} \\
& \left. + (\tilde{n}_{4\uparrow} + \tilde{n}_{3\uparrow} + \tilde{n}_{2\uparrow} - \tilde{n}_{1\uparrow})(\tilde{n}_{4\downarrow} - \tilde{n}_{3\downarrow} - \tilde{n}_{2\downarrow} - \tilde{n}_{1\downarrow}) \right\}, \tag{4.9}
\end{aligned}$$

L'énergie du fondamental Hartree-Fock et les énergies des états de trous et de particules sont données respectivement par

$$\begin{aligned}
E_{HF} &= -4t + \frac{3U}{4}, \\
\epsilon_{1\downarrow} &= -2t + \frac{U}{4}, & \epsilon_{1\uparrow} &= -2t + \frac{3U}{4}, \\
\epsilon_{2\downarrow} &= \epsilon_{3\downarrow} = \frac{U}{4}, & \epsilon_{2\uparrow} &= \epsilon_{3\uparrow} = \frac{3U}{4}, \\
\epsilon_{4\downarrow} &= 2t + \frac{U}{4}, & \epsilon_{4\uparrow} &= 2t + \frac{3U}{4}. \tag{4.10}
\end{aligned}$$

et les opérateurs dans (4.9) s'expriment comme

$$\tilde{n}_{k,\sigma} = b_{k,\sigma}^\dagger b_{k,\sigma} \quad \text{densité de quasiparticules du mode } (k, \sigma),$$

$$J_{p\sigma,h-\sigma}^- = b_{h,-\sigma} b_{p,\sigma} \quad \text{opérateur d'annihilation d'une paire de quasiparticules } ph,$$

$$J_{p\sigma,h-\sigma}^+ = b_{p,\sigma}^\dagger b_{h,-\sigma}^\dagger \quad \text{opérateur de création d'une paire de quasiparticules } ph.$$

$$S_{l\sigma,l'\sigma}^+ = b_{l\sigma}^\dagger b_{l'\sigma} \quad \text{avec } l > l' \quad \text{opérateur d'excitation avec deux indices soit de particule, soit de trou.}$$

$$S_{l'\sigma,l\sigma}^- = \left(S_{l\sigma,l'\sigma}^+ \right)^\dagger$$

En calculant les moments de transfert $q_{p\sigma',h\sigma} = k_{p\sigma'} - k_{h\sigma}$ ($-\pi \leq q_{ph} < \pi$) associés aux excitations particule-trou, on remarque que le moment de transfert prend les valeurs

$$q = \pm\pi/2, \pm\pi.$$

Le moment de transfert $q = -3\pi/2$ est équivalent à $q = \pi/2$ en ajoutant une période 2π .

4.2.2 ph -RPA standard

Nous développerons les équations de mouvement ph -RPA avec un opérateur d'excitation qui est composé par des excitations ph de même spin. Ainsi, avec la RPA standard,

on suppose que l'état fondamental du système est celui de HF. Les différentes valeurs moyennes des termes qui apparaissent dans ces calculs sont

$$\langle J_{ph}^+ J_{p'h'}^+ \rangle = \langle J_{ph}^- J_{p'h'}^- \rangle = \langle J_{ph}^+ J_{p'h'}^- \rangle = 0, \quad \langle J_{ph}^0 \rangle = \frac{1}{2}, \quad \langle J_{ph}^0 J_{p'h'}^0 \rangle = \frac{1}{4}.$$

D'après nos calculs, la matrice globale RPA se scindent en des sous-matrices pour les deux réponses, celles de charge et spin longitudinal d'une part et de spin transverse d'autre part, pour chaque $|q|$. La matrice \mathcal{A} pour chaque réponse se scinde selon les valeurs de q par contre \mathcal{B} couple les excitations qui correspondent aux vecteurs d'onde de transfert $\pm q$. A ce moment, on doit traiter chaque réponse à part pour chacune des valeurs de $|q|$. Nous présentons dans ce paragraphe la réponse de charge et spin longitudinal. Ainsi, par analogie, nous pouvons développer la réponse de spin transverse que nous n'avons pas voulu le mettre à raison de ne pas encombrer le manuscrit. Mentionnons ici que la solution exacte du modèle de Hubbard pour une chaîne à 4-sites est données dans l'annexe (B.2).

Pour $|q| = \frac{\pi}{2}$:

On définit l'opérateur d'excitation comme

$$\begin{aligned} Q_{\pm\frac{\pi}{2},\nu}^\dagger = & \mathcal{X}_{3\uparrow,1\uparrow}^\nu K_{3\uparrow,1\uparrow}^+ + \mathcal{X}_{4\downarrow,3\downarrow}^\nu K_{4\downarrow,3\downarrow}^+ + \mathcal{X}_{2\uparrow,1\uparrow}^\nu K_{2\uparrow,1\uparrow}^+ + \mathcal{X}_{4\downarrow,2\downarrow}^\nu K_{4\downarrow,2\downarrow}^+ \\ & - \mathcal{Y}_{3\uparrow,1\uparrow}^\nu K_{1\uparrow,3\uparrow}^- - \mathcal{Y}_{4\downarrow,3\downarrow}^\nu K_{3\downarrow,4\downarrow}^- - \mathcal{Y}_{2\uparrow,1\uparrow}^\nu K_{1\uparrow,2\uparrow}^- - \mathcal{Y}_{4\downarrow,2\downarrow}^\nu K_{2\downarrow,4\downarrow}^- \end{aligned} \quad (4.11)$$

avec $K_{p\sigma,h\sigma}^\pm = J_{p\sigma,h\sigma}^\pm / \sqrt{\langle -2 J_{ph\sigma}^0 \rangle}$ et en calculant les deux matrices $\mathcal{A}_{\pm\frac{\pi}{2}}$ et $\mathcal{B}_{\pm\frac{\pi}{2}}$, de dimension (4×4) chacune. Nous remarquons que ces deux dernières se scindent encore en deux sous-matrices de la manière suivante: Relativement aux opérateurs $K_{3\uparrow,1\uparrow}^+, K_{4\downarrow,3\downarrow}^+$ (pour les excitations qui correspondent à un moment de transfert $q = -\frac{\pi}{2}$) et $K_{2\uparrow,1\uparrow}^+, K_{4\downarrow,2\downarrow}^+$ (pour les excitations qui correspondent à un moment de transfert $q = +\frac{\pi}{2}$), la matrice $\mathcal{A}_{q=\pm\frac{\pi}{2}}$ s'écrit comme

$$\mathcal{A}_{\pm\frac{\pi}{2}} = \begin{pmatrix} \mathcal{A}_{-\frac{\pi}{2}} & 0 \\ 0 & \mathcal{A}_{\frac{\pi}{2}} \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \mathcal{A}_{-\frac{\pi}{2}} = \mathcal{A}_{\frac{\pi}{2}} = \begin{pmatrix} 2 & \frac{U}{4} \\ \frac{U}{4} & 2 \end{pmatrix}. \quad (4.12)$$

Par contre la matrice $\mathcal{B}_{\pm\frac{\pi}{2}}$ se scinde en deux sous matrices qui mélange les deux moments de transfert $q = \pm\frac{\pi}{2}$. La matrice $\mathcal{B}_{\pm\frac{\pi}{2}}$ s'écrit comme

$$\mathcal{B}_{\pm\frac{\pi}{2}} = \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{B}_{1\pm\frac{\pi}{2}} \\ \mathcal{B}_{1\pm\frac{\pi}{2}} & 0 \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \mathcal{B}_{1\pm\frac{\pi}{2}} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{U}{4} \\ \frac{U}{4} & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.13)$$

La matrice $\mathcal{B}_{\pm\frac{\pi}{2}}$ couple les états de $q = \frac{\pi}{2}$ avec ceux de $q = -\frac{\pi}{2}$. Ceci nous donne les deux valeurs propres doublement dégénérées,

$$\mathcal{E}_1 = \sqrt{4t - U}, \quad \mathcal{E}_2 = \sqrt{4t + U}, \quad (4.14)$$

qu'on trouvera aussi dans le canal $m_s = 0$ pour $|q| = \frac{\pi}{2}$ (éq.4.31). On remarque que la

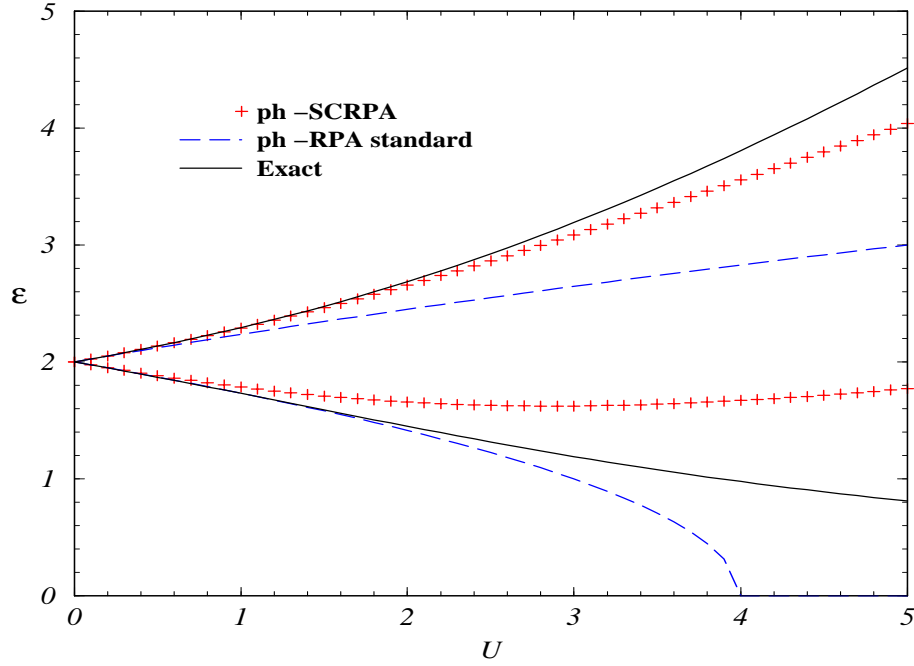


FIG. 4.3 – Comparaison des énergies d'excitations exactes, *ph -RPA standard* et *ph -SCRPA* pour la réponse de charge pour $|q| = \frac{\pi}{2}$.

s-RPA donne de bons résultats pour des petites valeurs de U (Fig.4.3). Par exemple pour le deuxième état excité, la s-RPA commence à s'écarter de la solution exacte pour une valeur de $U \approx 1$. Par contre, pour le premier état, elle suit de près la solution exacte jusqu'à $U \approx 2$. Après, elle s'éloigne fortement de la solution exacte et tend vers zéro en déclenchant un mode zéro et au delà de cette énergie elle devient imaginaire pure.

Pour $|q| = \pi$:

De même, on définit l'opérateur d'excitation relativement à ce canal comme

$$Q_{\pm\pi,\nu}^\dagger = \mathcal{X}_{4\uparrow,1\uparrow}^\nu K_{4\uparrow,1\uparrow}^+ + \mathcal{X}_{4\downarrow,1\downarrow}^\nu K_{4\downarrow,1\downarrow}^+ - \mathcal{Y}_{4\uparrow,1\uparrow}^\nu K_{1\uparrow,4\uparrow}^- - \mathcal{Y}_{4\downarrow,1\downarrow}^\nu K_{1\downarrow,4\downarrow}^- \quad (4.15)$$

et en calculant les matrices $\mathcal{A}_{\pm\pi}$ et $\mathcal{B}_{\pm\pi}$, de dimension 2×2 . Relativement à ces opérateurs, la matrice $\mathcal{A}_{q=\pm\pi}$ s'écrit comme

$$\mathcal{A}_{\pm\pi} = \begin{pmatrix} 4 & \frac{U}{4} \\ \frac{U}{4} & 4 \end{pmatrix}, \quad (4.16)$$

et la matrice $\mathcal{B}_{\pm\pi}$ s'écrit comme

$$\mathcal{B}_{\pm\pi} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{U}{4} \\ \frac{U}{4} & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.17)$$

Ceci nous donne les valeurs propres

$$\mathcal{E}_3 = \sqrt{16t - 2U}, \quad \mathcal{E}_4 = \sqrt{16t + 2U}, \quad (4.18)$$

qu'on trouvera aussi dans le canal $m_s = 0$ pour $|q| = \pi$ (éq.4.35). On remarque que la

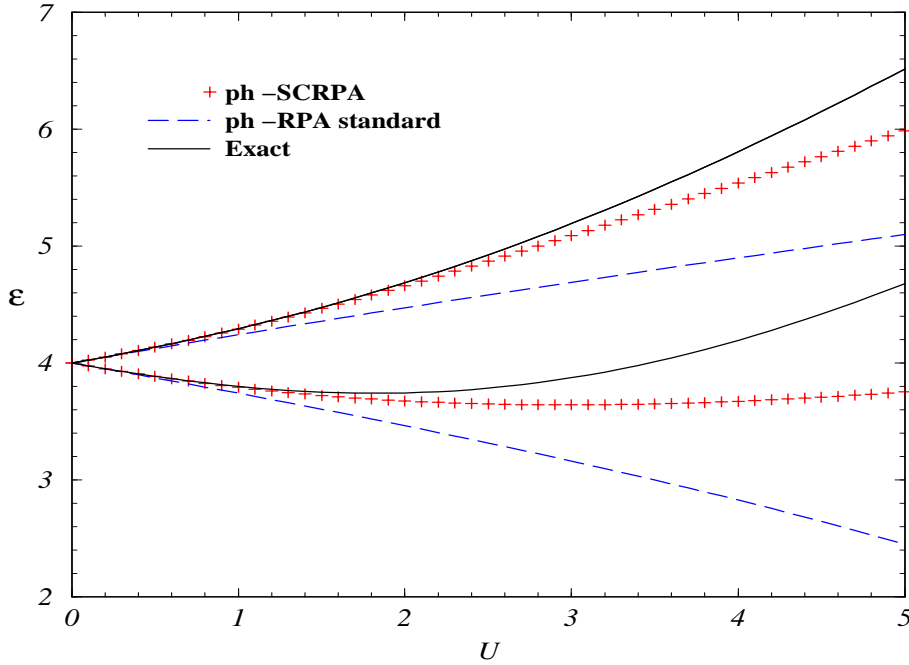


FIG. 4.4 – Comparaison des énergies d'excitations exactes, *ph -RPA standard* et *ph -SCRPA* pour la réponse de charge pour $|q| = \pi$.

s-RPA ici est complètement loin du compte du fait qu'elle s'échappe de la solution exacte pour les deux énergies obtenues dans ce canal (voir Fig.4.4) même pour U faible. Par exemple, l'énergie, \mathcal{E}_3 , décroît en fonction de U alors que la solution exacte croît à partir de $U \simeq 2$. Ceci montre bien que la s-RPA surestime les corrélations dans le sens que la pente de \mathcal{E}_3 simule un système attractif où en réalité il est répulsif.

L'énergie fondamentale RPA est donnée par

$$E_{RPA} = E_{HF} - \sum_{\nu} \mathcal{E}_{\nu} \sum_{hp} |\mathcal{Y}_{hp}^{\nu}|^2 \quad (4.19)$$

$$= E_{HF} - \frac{1}{2} \text{tr}(\mathcal{A}) + \frac{1}{2} \sum_{\nu} \mathcal{E}_{\nu}. \quad (4.20)$$

et est représentée sur la figure (Fig.4.5) dans le canal $m_s = -1$. On constate qu'elle est bonne jusqu'à $U \approx 3.5$ mais qu'elle se dégrade fortement en s'approchant du point de transition de phase.

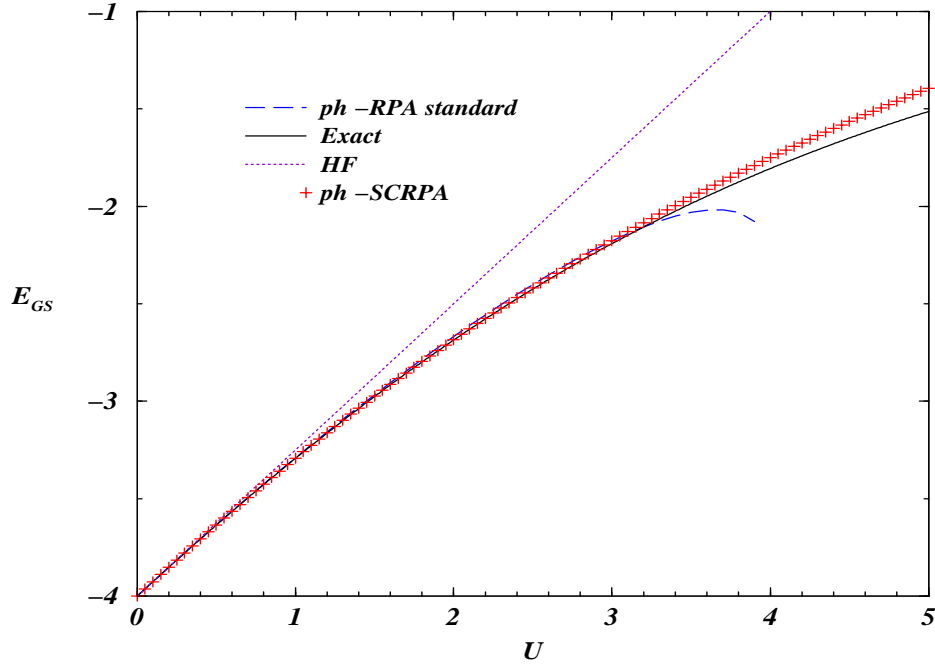


FIG. 4.5 – L'énergie du fondamental HF, *ph* -RPA, *ph* -SCRPA et exact dans la réponse de charge pour $m_s = -1$.

4.2.3 *ph* -SCRPA

Comme auparavant, on initialise le calcul itératif SCRPA par la solution RPA standard et nous suivons la même démarche et le même développement de système d'équations que ceux du paragraphe (3.2) du chapitre traitant les 6-sites. Ainsi, on obtient les résultats présentés sur les figures (Fig.4.3) et (Fig.4.4) pour les deux transferts $|q| = \frac{\pi}{2}$ et $|q| = \pi$, respectivement. On remarque, pour $|q| = \frac{\pi}{2}$, que le premier état excité n'est pas bien reproduit par la SCRPA, mais le deuxième état est une bonne approximation et suit de près la solution exacte. Pour le canal $|q| = \pi$, on a des constatations similaires (voir Fig.4.4) mais la SCRPA améliore quand même nettement la situation pour les deux états. Pour le fondamental (Fig.4.5), la SCRPA est en bon accord avec la solution exacte jusqu'à $U = 5$. Par contre comme cela a déjà été dit, la s-RPA s'éloigne très fortement en se rapprochant du point de transition à $U = 4$. Ceci est vrai aussi pour les états excités (voir

Fig.4.4). En conclusion nous avons trouvé que la SCRPA améliore nettement la s-RPA aussi pour les 4-sites demi-pleins avec projection $m_s = \pm 1$. Mais l'amélioration n'est pas aussi spectaculaire que celle qui a été trouvée dans le cas à 6-sites.

4.3 Chaîne demi-pleine avec la projection du spin $m_s = 0$

Maintenant, on s'intéresse au canal $m_s = 0$ où les valeurs moyennes dans l'état (4.3) (ou (4.4)) des différents termes de densité qui figurent dans l'expression de l'hamiltonien (4.1) dans l'approximation HF sont donnés par

$$\begin{aligned} \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle &= \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle = \frac{1}{2} \\ \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i+1\uparrow} \rangle &= \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i+1\downarrow} \rangle = \frac{1}{4}. \end{aligned} \quad (4.21)$$

On remarque que les densités restent uniformes. Les énergies d'excitations HF (à une

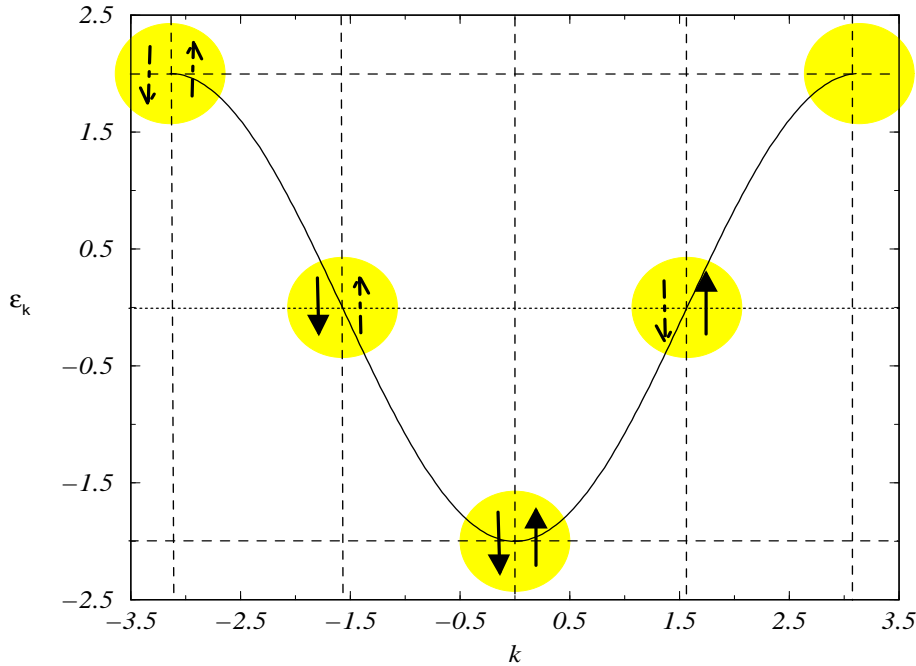


FIG. 4.6 – Spectre d'excitation HF à $U = 0$ pour la chaîne à 4-sites demi-pleine avec la projection de spin $m_s = 0$. Les états occupés sont représentés par les flèches pleines et ceux non-occupés sont représentés par les flèches trait-tiré.

particule) sont donnée par :

$$\epsilon_{k_1} = -2t + \frac{U}{2}, \quad \epsilon_{k_2} = \epsilon_{k_3} = \frac{U}{2}, \quad \epsilon_{k_4} = 2t + \frac{U}{2}. \quad (4.22)$$

En calculant les moments de transfert $q_{ph} = k_p - k_h$ ($-\pi \leq q_{ph} < \pi$) associés aux excitations particule-trou pour la chaîne à quatre sites demi-pleine et avec un nombre égal de spin- \uparrow et de spin- \downarrow :

Pour le spin- \uparrow : $31 \rightarrow q_{31\uparrow} = q_{1\uparrow} = -\frac{\pi}{2}$ $42 \rightarrow q_{42\uparrow} = q_{2\uparrow} = -\frac{3\pi}{2}$ $32 \rightarrow q_{32\uparrow} = q_{3\uparrow} = -\pi$ $41 \rightarrow q_{41\uparrow} = q_{4\uparrow} = -\pi$	Pour le spin- \downarrow : $21 \rightarrow q_{21\downarrow} = q_{1\downarrow} = +\frac{\pi}{2}$ $43 \rightarrow q_{43\downarrow} = q_{2\downarrow} = -\frac{\pi}{2}$ $23 \rightarrow q_{23\downarrow} = q_{3\downarrow} = +\pi$ $41 \rightarrow q_{41\downarrow} = q_{4\downarrow} = -\pi$
---	--

On remarque que le moment de transfert prend les valeurs $\pm\pi/2$ et $\pm\pi$ parce que le moment de transfert $q = -3\pi/2$ est équivalent à $q = \pi/2$ en ajoutant une période 2π .

4.3.1 Hamiltonien de quasiparticules Hartree-Fock

Comme auparavant nous restons dans la base invariante par translation. On peut étudier notre modèle dans cette phase. Comme auparavant, on définit les opérateurs $b_{k,\sigma}$ de telle sorte que l'action d'un destructeur sur l'état HF donne zéro pour tout k ,

$$\begin{pmatrix} a_{1,\uparrow} \\ a_{1,\downarrow} \\ a_{2,\uparrow} \\ a_{3,\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{1,\uparrow}^\dagger \\ b_{1,\downarrow}^\dagger \\ b_{2,\uparrow}^\dagger \\ b_{3,\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} a_{2,\downarrow} \\ a_{3,\uparrow} \\ a_{4,\uparrow} \\ a_{4,\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{2,\downarrow} \\ b_{3,\uparrow} \\ b_{4,\uparrow} \\ b_{4,\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (4.23)$$

Ainsi, l'hamiltonien (4.1) se transforme comme

$$H = H_{HF} + H_{int} \quad (4.24)$$

avec, en ordre normal,

$$\begin{aligned} H_{HF} = E_{HF} & - \epsilon_{h_1} (\tilde{n}_{1,\uparrow} + \tilde{n}_{1,\downarrow}) - \epsilon_{h_2} (\tilde{n}_{2,\uparrow} + \tilde{n}_{3,\downarrow}) \\ & + \epsilon_{p_1} (\tilde{n}_{3,\uparrow} + \tilde{n}_{2,\downarrow}) + \epsilon_{p_2} (\tilde{n}_{4,\uparrow} + \tilde{n}_{4,\downarrow}), \\ \frac{4}{U} H_{int} & = \left[(S_{34,\uparrow}^- - S_{12,\uparrow}^-) + cc \right] \left[(S_{24,\downarrow}^- - S_{13,\downarrow}^-) + cc \right] \\ & + \left(J_{13,\uparrow}^- + J_{42,\uparrow}^+ \right) \left[(S_{24,\downarrow}^- - S_{13,\downarrow}^-) + cc \right] + \left[(S_{34,\uparrow}^- - S_{12,\uparrow}^-) + cc \right] \left(J_{21,\downarrow}^- + J_{43,\downarrow}^+ \right) \\ & + \left(J_{42,\uparrow}^- + J_{31,\uparrow}^+ \right) \left(J_{34,\downarrow}^- + J_{21,\downarrow}^+ \right) + \left(J_{13,\uparrow}^- + J_{24,\uparrow}^+ \right) \left(J_{12,\downarrow}^- + J_{34,\downarrow}^+ \right) \\ & + \left[\left(J_{14,\uparrow}^- + J_{23,\uparrow}^+ \right) + cc \right] \left[\left(J_{14,\downarrow}^- + J_{32,\downarrow}^+ \right) + cc \right], \end{aligned} \quad (4.25)$$

avec les mêmes notations qu'en (4.2.1) et les énergies HF

$$\epsilon_{h_1} = -2t + \frac{U}{2}, \quad \epsilon_{h_2} = \frac{U}{2}, \quad \epsilon_{p_1} = \frac{U}{2}, \quad \epsilon_{p_2} = 2t + \frac{U}{2}. \quad (4.26)$$

4.3.2 ph –RPA standard

Avec la RPA standard, on suppose que l'état fondamental du système est celui de HF. Les différentes valeurs moyennes des termes qui apparaissent dans ces calculs sont :

$$\langle J_{ph,\sigma}^{\pm} J_{p'h',\sigma'}^{\pm} \rangle = 0 \quad \langle J_{ph,\sigma}^0 \rangle = \frac{1}{2} \quad \langle J_{ph,\sigma}^0 J_{p'h',\sigma'}^0 \rangle = \frac{1}{4}. \quad (4.27)$$

Comme pour le cas à 2 et 6 –sites, la matrice globale RPA se scindent en sous-matrices d'une valeur $|q|$ donnée, ici une pour $|q| = \pi/2$ et l'autre pour $|q| = \pi$. Ceci nous amène à considérer que $|q|$ est un bon nombre quantique et nous permettra d'étudier les deux canaux séparément.

Pour $|q| = \frac{\pi}{2}$

L'opérateur d'excitation est donné par

$$\begin{aligned} Q_{|q|=\frac{\pi}{2},\nu}^{\dagger} = & \mathcal{X}_{31,\uparrow}^{\nu} K_{31,\uparrow}^{+} + \mathcal{X}_{42,\uparrow}^{\nu} K_{42,\uparrow}^{+} + \mathcal{X}_{21,\downarrow}^{\nu} K_{21,\downarrow}^{+} + \mathcal{X}_{43,\downarrow}^{\nu} K_{43,\downarrow}^{+} \\ & - \mathcal{Y}_{31,\uparrow}^{\nu} K_{31,\uparrow}^{-} - \mathcal{Y}_{42,\uparrow}^{\nu} K_{42,\uparrow}^{-} - \mathcal{Y}_{21,\downarrow}^{\nu} K_{21,\downarrow}^{-} - \mathcal{Y}_{43,\downarrow}^{\nu} K_{43,\downarrow}^{-} \end{aligned} \quad (4.28)$$

avec $K_{p\sigma,h\sigma}^{\pm} = J_{p\sigma,h\sigma}^{\pm} / \sqrt{\langle -2 J_{ph\sigma}^0 \rangle}$ et en calculant les deux matrices \mathcal{A} et \mathcal{B} , de dimension 4×4 . Nous remarquons que ces deux dernières se scindent encore en deux sous-matrices. Relativement aux opérateurs $K_{31,\uparrow}^{+}$, $K_{43,\downarrow}^{+}$ (pour les excitations qui correspondent à un moment de transfert $q = -\frac{\pi}{2}$) et $K_{42,\uparrow}^{+}$, $K_{21,\downarrow}^{+}$ (pour les excitations qui correspondent à un moment de transfert $q = +\frac{\pi}{2}$), la matrice $\mathcal{A}_{\pm\frac{\pi}{2}}$ s'écrit comme

$$\mathcal{A}_{\pm\frac{\pi}{2}} = \begin{pmatrix} \mathcal{A}_{-\frac{\pi}{2}} & 0 \\ 0 & \mathcal{A}_{\frac{\pi}{2}} \end{pmatrix} \quad \mathcal{A}_{-\frac{\pi}{2}} = \mathcal{A}_{\frac{\pi}{2}} = \begin{pmatrix} 2 & \frac{U}{4} \\ \frac{U}{4} & 2 \end{pmatrix}. \quad (4.29)$$

Par contre la matrice $\mathcal{B}_{\pm\frac{\pi}{2}}$ se scinde en deux sous matrices qui mélange les deux moments de transfert $q = \pm\frac{\pi}{2}$. Relativement aux opérateurs $(K_{13,\uparrow}^{-}, K_{34,\downarrow}^{-})$ avec $q = -\frac{\pi}{2}$ et $(K_{24,\uparrow}^{-}, K_{12,\downarrow}^{-})$ avec $q = +\frac{\pi}{2}$, la matrice $\mathcal{B}_{\pm\frac{\pi}{2}}$ s'écrit comme

$$\mathcal{B}_{\pm\frac{\pi}{2}} = \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{B}_1 \\ \mathcal{B}_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{B}_1 = \begin{pmatrix} 0 & \frac{U}{4} \\ \frac{U}{4} & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.30)$$

La matrice $\mathcal{B}_{q=\pm\frac{\pi}{2}}$ couple les états de $q = \pi/2$ avec ceux de $q = -\pi/2$. Ceci nous donne les deux valeurs propres doublement dégénérées,

$$\mathcal{E}_1 = \sqrt{4t - U}, \quad \mathcal{E}_2 = \sqrt{4t + U}. \quad (4.31)$$

Ces deux valeurs propres, on les a trouvé aussi dans le canal $m_s = -1$ pour $|q| = \frac{\pi}{2}$ (voir éq. 4.14). Elles sont représentées sur la figure (Fig.4.7).

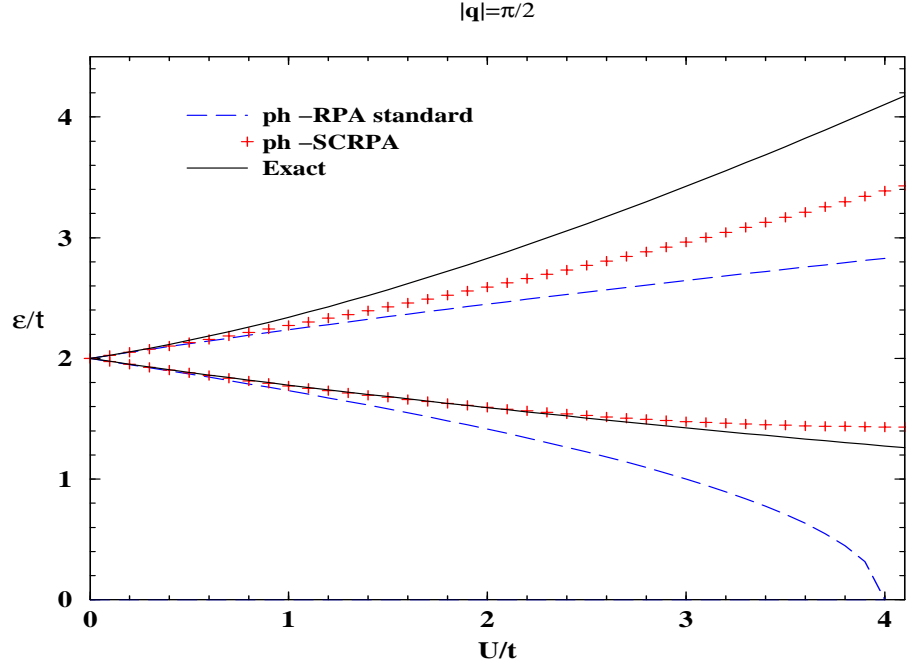


FIG. 4.7 – Spectre d'excitation obtenu par la *ph-RPA standard*, *ph-SCRPA* et exacte pour $q = \frac{\pi}{2}$ dans le cas où on élimine les mode d'excitation zéro dans la base sphérique et $m_s = 0$.

Pour $|q| = \pi$

De même, on définit l'opérateur d'excitation relativement à ce canal comme

$$Q_{|q|=\pi,\nu}^\dagger = \begin{aligned} & \mathcal{X}_{14,\uparrow}^\nu K_{41,\uparrow}^+ + \mathcal{X}_{14,\downarrow}^\nu K_{41,\downarrow}^+ + \mathcal{X}_{23,\uparrow}^\nu K_{32,\uparrow}^+ + \mathcal{X}_{32,\downarrow}^\nu K_{23,\downarrow}^+ \\ & - \mathcal{Y}_{14,\uparrow}^\nu K_{14,\uparrow}^- - \mathcal{Y}_{14,\downarrow}^\nu K_{14,\downarrow}^- - \mathcal{Y}_{23,\uparrow}^\nu K_{23,\uparrow}^- - \mathcal{Y}_{32,\downarrow}^\nu K_{32,\downarrow}^- \end{aligned} \quad (4.32)$$

et en calculant les matrices \mathcal{A} et \mathcal{B} , de dimension 4×4 . Relativement aux opérateurs $K_{41,\uparrow}^+$ ($q = -\pi$), $K_{41,\downarrow}^+$ ($q = -\pi$), $K_{32,\uparrow}^+$ ($q = -\pi$) et $K_{23,\downarrow}^+$ ($q = +\pi$), la matrice $\mathcal{A}_{\pm\pi}$ s'écrit comme

$$\mathcal{A}_{\pm\pi} = \begin{pmatrix} \mathcal{A}_1 & \mathcal{A}_2 \\ \mathcal{A}_2 & \mathcal{A}_2 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{A}_1 = \begin{pmatrix} 4 & \frac{U}{4} \\ \frac{U}{4} & 4 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{A}_2 = \begin{pmatrix} 0 & \frac{U}{4} \\ \frac{U}{4} & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.33)$$

et relativement aux opérateurs $K_{14,\uparrow}^-$ ($q = -\pi$), $K_{14,\downarrow}^-$ ($q = -\pi$), $K_{23,\uparrow}^-$ ($q = -\pi$) et $K_{32,\downarrow}^-$ ($q = +\pi$), la matrice $\mathcal{B}_{\pm\pi}$ s'écrit comme

$$\mathcal{B}_{\pm\pi} = \begin{pmatrix} \mathcal{A}_2 & \mathcal{A}_2 \\ \mathcal{A}_2 & \mathcal{A}_2 \end{pmatrix}. \quad (4.34)$$

Ceci nous donne les valeurs propres

$$\mathcal{E}_3 = \sqrt{16t - 2U}, \quad \mathcal{E}_4 = \sqrt{16t + 2U}, \quad \mathcal{E}_5 = 0, \quad (4.35)$$

on les a trouvé aussi dans le canal $m_s = -1$ pour $|q| = \pi$ (voir éq. 4.18) sauf la valeur propre $\mathcal{E}_5 = 0$ qui est 4-fois dégénérée. Les énergies \mathcal{E}_3 et \mathcal{E}_4 sont représentées sur la figure (Fig.4.8).

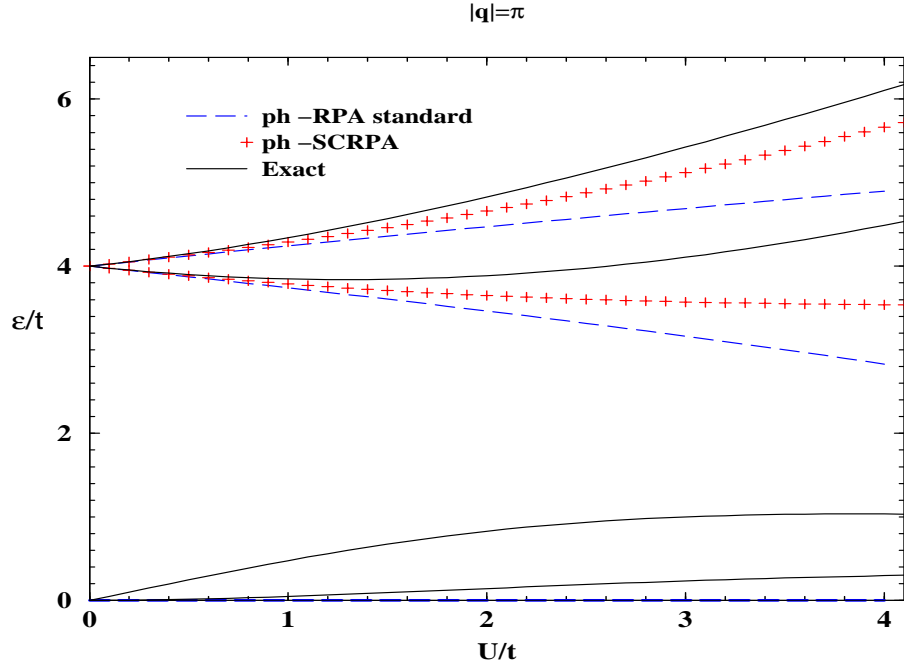


FIG. 4.8 – Spectre d'excitation obtenu par la *ph -RPA standard*, *ph -SCRPA* et *exacte* pour $q = \pi$ dans le cas où on élimine les modes d'excitation zéro dans la base sphérique et $m_s = 0$.

Mode zéro

La valeur propre zéro, $\mathcal{E}_5 = 0$ en (4.35) est 4-fois dégénérée. Vu que la matrice RPA est anti-symétrique, le spectre RPA est donnée comme un espace d'énergie positive et son homologue négative. Réellement, c'est uniquement le spectre positif qui a un sens physique. Par conséquent, on a seulement un mode d'excitation zéro qui est dégénéré deux-fois. Les vecteurs propres non-normalisés correspondants sont

$$\begin{aligned} V_1^0 &= [0, 0, 0, -1, 0, 0, 0, 1] \\ V_2^0 &= [0, 0, -1, 0, 0, 0, 1, 0] \end{aligned} \quad (4.36)$$

On remarque que les composantes non-nulles pour V_1 sont $\mathcal{X}_{23,\uparrow}^1 = -1$ et $\mathcal{Y}_{23,\uparrow}^1 = 1$ (pour $\nu = 1$) et pour V_2 sont $\mathcal{X}_{23,\downarrow}^2 = -1$ et $\mathcal{Y}_{23,\downarrow}^2 = 1$ (pour $\nu = 2$). Avec la normalisation, $\sum_i (\mathcal{X}_i^2 - \mathcal{Y}_i^2)$, les amplitudes deviennent infinies.

4.3.3 *ph* -SCRPA

Comme d'habitude, nous initialisons le calcul self consistant par la solution RPA standard. Nous avons deux voies $|q| = \pi$ et $|q| = \frac{\pi}{2}$. Dans le dernier cas nous procédons exactement comme pour les 6-sites et il n'y a pas de problème car il n'y a pas de mode zéro dans ce canal. Le résultat pour $|q| = \frac{\pi}{2}$ est donné dans la figure (Fig.4.7). On voit que

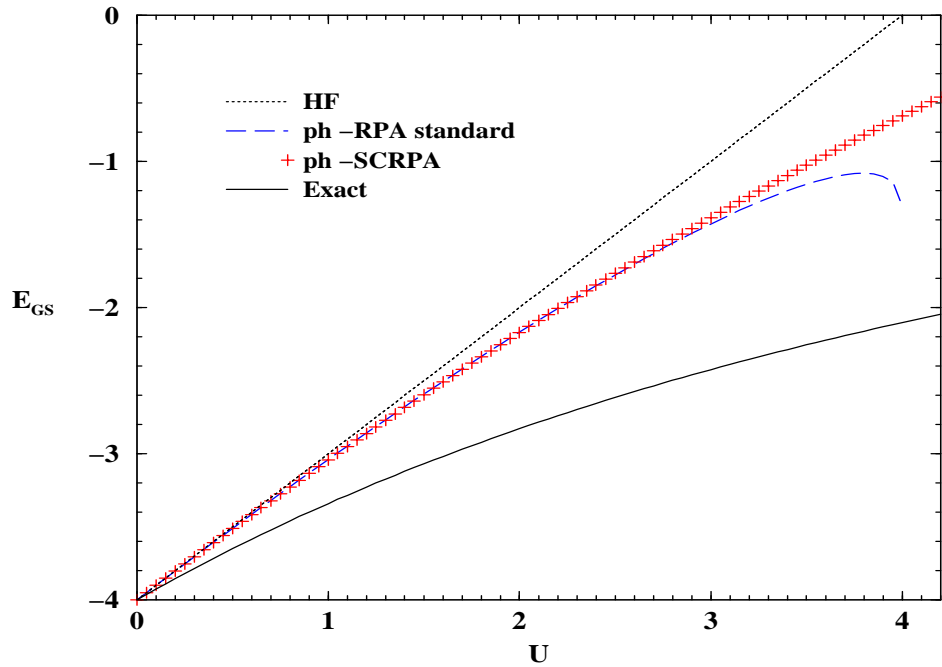


FIG. 4.9 – *Energie du fondamental obtenue par la *ph* -RPA standard, *ph* -SCRPA et exacte dans le cas où on élimine les modes d'excitations zéro dans la base des ondes planes et pour la projection de spin $m_s = 0$.*

la SCRPA donne un excellent accord avec l'état exact à basse énergie où la RPA standard échoue complètement sauf pour des petites valeurs de U . Par contre pour le deuxième état, la SCRPA réduit l'écart entre la s-RPA et la solution exacte uniquement de moitié. En ce qui concerne le transfert $|q| = \pi$, nous rencontrons le problème déjà mentionné au début de ce chapitre : la s-RPA donne deux modes de zéro énergie et de ce fait nous n'avons pas pu stabiliser la SCRPA dans ce canal. Comme solution ad hoc mais qui d'un point de vue

pragmatique ne semble pas complètement déraisonnable, nous avons simplement exclu les deux configurations dans l'opérateur RPA (4.32) qui pose problème. Ceci correspond alors simplement à un calcul SCRPA dans un espace de configuration réduit. Les résultats sont montrés sur la figure (Fig.4.8). On voit qu'en dépit de notre ansatz atrophié l'écart entre la s-RPA et la solution exacte est encore réduit par moitié. Sur la même figure, nous montrons aussi les premiers états excités exacts qui se trouvent à basse énergie et qui sûrement auraient dû être décrits par les configurations que nous avons éliminées.

Pour le fondamental, on voit bien sur la figure (Fig.4.9) qu'on n'a pas obtenu de bonnes corrections par la SCRPA. En plus, le fondamental HF dans la base des ondes planes ne représente pas un minimum absolu. Ce qui montre bien au voisinage de $U = 0$, que les solutions s-RPA et SCRPA restent plus proches de celle HF que de la solution exacte. D'autre part, il faut signaler la grande importance des modes d'excitation zéro sur les corrélations du fondamental.

4.4 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons traité le cas à 4-sites avec 4-électrons. Comme discuté au début du chapitre, ce cas, comme tous les cas de chaîne à $4n$ avec $n = 1, 2, 3, \dots$, constitue un problème à part parce qu'au niveau HF le dernier niveau, là où se situe l'énergie de Fermi, n'est rempli qu'à moitié. Les deux et six -sites ainsi que toutes les configurations $4n + 2$ sites ont le dernier niveau complet. C'est comme en physique nucléaire où on parle de couches fermées et de couches ouvertes. Il est bien connu que les cas à couches ouvertes posent problème. Dans notre cas, comme on va le voir dans le chapitre suivant, la solution HF dans la base des ondes planes est complètement instable et elle veut, dès que $U \neq 0$, aller à une solution avec magnétisation antiferromagnétique non nulle. Malgré tout, dans ce chapitre, nous avons forcé le maintien de la symétrie en imposant la base des ondes planes. Moyennant quelques petites jongleries, nous avons encore pu obtenir des résultats honorables par la SCRPA ce qui est une démonstration de sa flexibilité. Néanmoins, il faut dire que ce cas de figure, qu'au début nous avons commencé à étudier tout naturellement après le cas à deux sites, nous a posé pas mal de problème avant d'avoir réellement compris ce qui se passe et où se situe ce problème. C'est un peu dommage car cela nous a coûté pas mal de temps et nous a finalement empêché d'aller plus loin en nombre de sites pour les cas semi-pleins à $4n + 2$ électrons où la SCRPA marche sans problème.

Pour réellement faire du progrès dans ce problème à $4n$ sites il faut sûrement étendre la présente approche en incluant dans l'opérateur RPA des composantes à 2-corps telles qu'on les obtient en commutant les composantes actuelles avec la partie interaction de H .

Par exemple,

$$\begin{aligned}
[H_{int}, J_{31,\uparrow}^+] = & + \frac{U}{4} (1 - M_{13,\uparrow}) \left\{ (J_{12,\downarrow}^- + J_{43,\downarrow}^+) + [(S_{13,\downarrow}^- + S_{24,\downarrow}^-) + h.c.] \right\} \\
& + \frac{U}{4} (J_{42,\uparrow}^+ - J_{31,\uparrow}^+) \left\{ (J_{12,\downarrow}^- + J_{43,\downarrow}^+) + [(S_{13,\downarrow}^- + S_{24,\downarrow}^-) + h.c.] \right\} \\
& + \frac{U}{4} (S_{12,\uparrow}^- + S_{34,\uparrow}^-) \left\{ (J_{32,\downarrow}^- + J_{23,\downarrow}^+) + [(J_{14,\downarrow}^- + J_{41,\downarrow}^+) + h.c.] \right\},
\end{aligned}$$

On peut démontrer qu'en choisissant l'espace de ces opérateurs supplémentaires à 2-corps suffisamment large, en plus du cas à deux sites, le problème à quatre sites avec 4 électrons est également résolu exactement [51]. Ce genre d'extension de l'approche doit cependant rester pour des travaux futurs.

Chapitre 5

Modèle de Hubbard à 4-sites avec une transformation Hartree–Fock générale

Nous avons vu dans le chapitre précédant que l’approche HF–RPA et SCRPA posent des problèmes dans la base des ondes planes pour le cas à 4-sites demi-plein. Il est donc naturel d’essayer une transformation HF générale qui engendre une aimantation antiferromagnétique non nulle. C’est ce que nous allons faire dans le paragraphe suivant. Il est aussi à prévoir que dans la nouvelle base la RPA et SCRPA ont un comportement stable. Nous remarquerons que les deux états dégénérés se séparent dès que $U \neq 0$. Ainsi, on se retrouve avec un spectre d’excitation où la couche supérieure est complètement remplie. Nous commencerons avec l’approximation HF générale afin de reproduire le spectre d’excitation de quasiparticules. La transformation générale obtenue montre qu’on est toujours sur un minimum HF absolu de l’énergie HF.

5.1 Approximation de Hartree–Fock

Le calcul numérique de la solution HF self consistante, nous montre que les

$$n_{i,\uparrow\downarrow} = \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle = \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle = 0 , \quad (5.1)$$

c’est à dire on n’a pas une brisure spontanée de symétrie de spin dans le sens qu’on devrait mélanger les spin- \uparrow et spin- \downarrow dans la transformation HF. En plus, les densités de quasiparticules dans l’état HF ont la propriété suivante

$$n_{1,\sigma} = n_{3,\sigma} , \quad n_{2,\sigma} = n_{4,\sigma} . \quad (5.2)$$

Dans ce cas l'expression de l'hamiltonien HF (2.2) devient assez simple et nous pouvons retrouver une forme analytique pour la transformation HF de la forme suivante

$$\begin{pmatrix} c_{1,\uparrow}^\dagger \\ c_{2,\uparrow}^\dagger \\ c_{3,\uparrow}^\dagger \\ c_{4,\uparrow}^\dagger \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} v & -1 & 0 & u \\ u & 0 & -1 & -v \\ v & 1 & 0 & u \\ v & 0 & 1 & -v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{1,\uparrow}^\dagger \\ a_{2,\uparrow}^\dagger \\ a_{3,\uparrow}^\dagger \\ a_{4,\uparrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (5.3)$$

$$\begin{pmatrix} c_{4,\downarrow}^\dagger \\ c_{3,\downarrow}^\dagger \\ c_{2,\downarrow}^\dagger \\ c_{1,\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} v & -1 & 0 & u \\ u & 0 & -1 & -v \\ v & 1 & 0 & u \\ v & 0 & 1 & -v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{1,\downarrow}^\dagger \\ a_{2,\downarrow}^\dagger \\ a_{3,\downarrow}^\dagger \\ a_{4,\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (5.4)$$

Ainsi, la transformation inverse est donnée par

$$\begin{pmatrix} a_{1,\uparrow}^\dagger \\ a_{2,\uparrow}^\dagger \\ a_{3,\uparrow}^\dagger \\ a_{4,\uparrow}^\dagger \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} v^* & u & v^* & v^* \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \\ u & -v^* & u & -v^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{1,\uparrow}^\dagger \\ c_{2,\uparrow}^\dagger \\ c_{3,\uparrow}^\dagger \\ c_{4,\uparrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (5.5)$$

$$\begin{pmatrix} a_{1,\downarrow}^\dagger \\ a_{2,\downarrow}^\dagger \\ a_{3,\downarrow}^\dagger \\ a_{4,\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} v^* & u & v^* & v^* \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \\ u & -v^* & u & -v^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{4,\downarrow}^\dagger \\ c_{3,\downarrow}^\dagger \\ c_{2,\downarrow}^\dagger \\ c_{1,\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (5.6)$$

avec $u = \cos(\vartheta)$ et $v = \sin(\vartheta) e^{i\varphi}$. Ainsi, on définit l'état HF, pour le cas demi-plein avec $m_s = 0$ (c'est à dire deux électrons de spin- \uparrow et deux \downarrow), comme

$$|HF\rangle = a_{1,\uparrow}^\dagger a_{1,\downarrow}^\dagger a_{2,\uparrow}^\dagger a_{2,\downarrow}^\dagger |-\rangle. \quad (5.7)$$

L'énergie HF correspondante est donnée par

$$E_{HF} = -4t \sin(2\vartheta) \cos(\varphi) + U \cos^2(\vartheta) (1 + \sin^2(\vartheta)). \quad (5.8)$$

La minimisation de cette expression de E_{HF} par rapport à φ et ϑ nous donne $\varphi = 0$ et l'équation suivante pour ϑ

$$\tan^4(\vartheta) - \frac{U}{2t} \tan^3(\vartheta) - 1 = 0. \quad (5.9)$$

La solution de cette équation nous donne quatre valeurs de ϑ ,

$$\vartheta = \arctan \left\{ \frac{x}{4} \pm \frac{\sqrt{3}}{12} y \pm \frac{\sqrt{6}}{12} \sqrt{\frac{48}{z} + \frac{3\sqrt{3}x^3}{y} + 3x^2 - z} \right\} \quad (5.10)$$

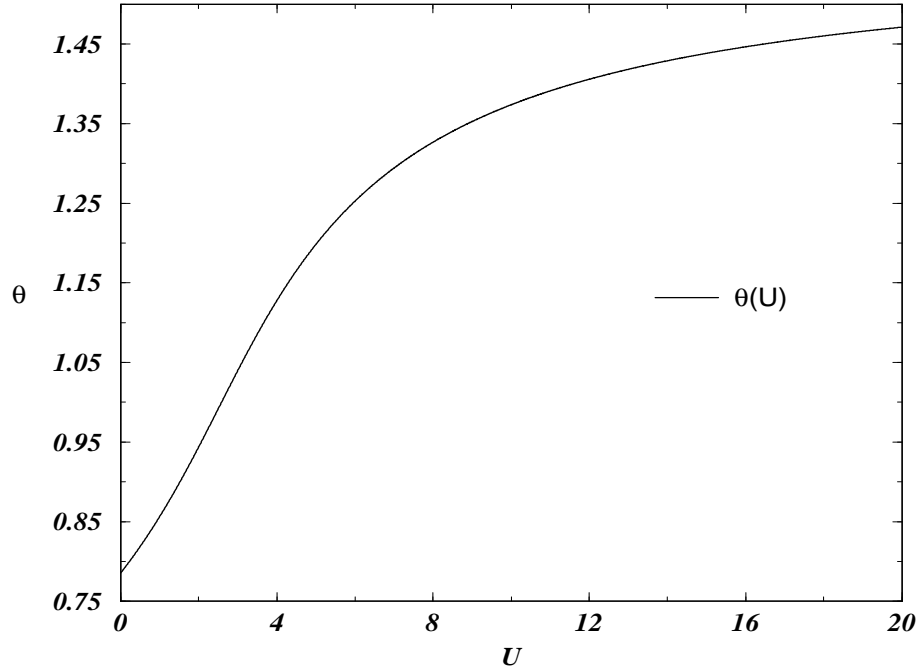


FIG. 5.1 – Cette figure représente la valeur de ϑ , qui correspond à l'énergie minimale HF, en fonction de U (cas à 4-sites avec une transformation HF générale).

avec

$$x = \frac{U}{2t}, \quad z = \left(-108x^2 + 12\sqrt{768 + 81x^4} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad y = \sqrt{3x^2 + 2z - \frac{96}{z}}.$$

Il y a seulement deux solutions réelles pour $-\pi/2 < \vartheta < \pi/2$ et $U \geq 0$. La valeur de ϑ qui correspond au minimum absolu est

$$\vartheta = \arctan \left\{ \frac{x}{4} + \frac{\sqrt{3}}{12}y + \frac{\sqrt{6}}{12} \sqrt{\frac{48}{z} + \frac{3\sqrt{3}x^3}{y} + 3x^2 - z} \right\} \quad (5.11)$$

Pour mieux voir la variation de ϑ , qui correspond à l'énergie minimale, en fonction de U on représente la fonction $\vartheta(U)$ sur la figure (Fig.5.1). Ainsi, les nombres d'occupation sont donnés par

$$\begin{aligned} n_{1,\uparrow} &= n_{3,\uparrow} = n_{2,\downarrow} = n_{4,\downarrow} = \frac{1}{2} \left(1 + \sin^2(\vartheta) \right) \\ n_{1,\downarrow} &= n_{3,\downarrow} = n_{2,\uparrow} = n_{4,\uparrow} = \frac{1}{2} \cos^2(\vartheta) \end{aligned} \quad (5.12)$$

et représentés sur la figure (Fig.5.2). On remarque bien que le remplissage de différents sites n'est pas uniforme. Ceci explique qu'il y a une brisure spontanée de la symétrie de

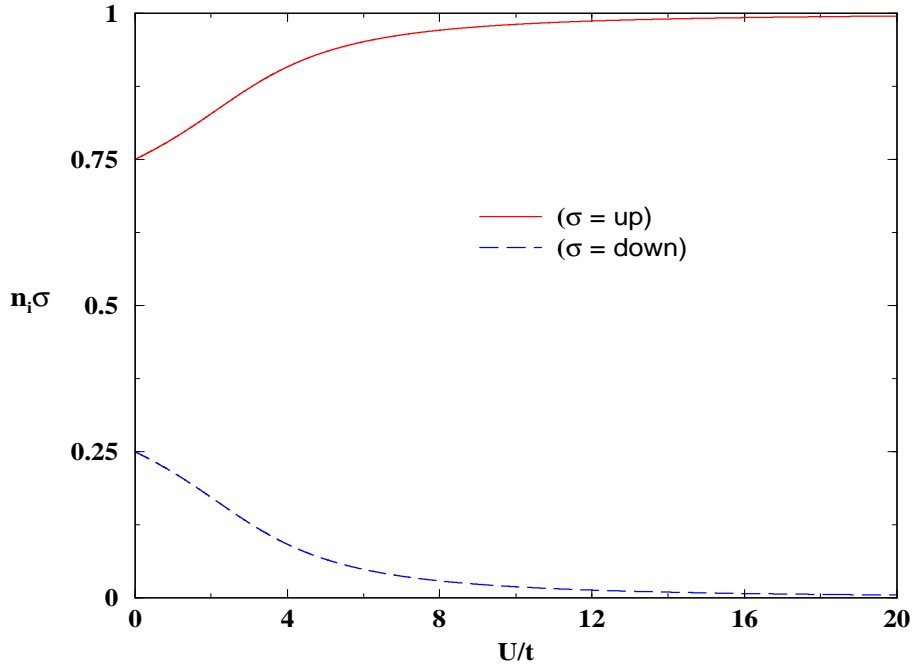


FIG. 5.2 – Cette figure représente les nombres d'occupation du site 1, $n_{1,\uparrow}$ et $n_{1,\downarrow}$, en fonction de l'interaction U .

translation pour toute valeur de U et qu'à posteriori que notre tentative de la SCRPA dans la base sphérique était voué à rencontrer des difficultés. On peut le voir aussi en calculant l'aimantation m ,

$$m = |\langle \hat{n}_{i,\uparrow} \rangle - \langle \hat{n}_{i,\downarrow} \rangle| = \frac{1}{2} (1 - \cos(2\vartheta)). \quad (5.13)$$

On voit donc qu'une aimantation antiferromagnétique s'enclenche dès que $U \neq 0$. Contrairement au cas à 6-sites, la base des ondes planes est instable pour toute valeur de U . Maintenant, il reste à exprimer l'hamiltonien (2.1) dans la nouvelle base pour entamer notre étude avec les différentes méthodes approximatives.

5.2 Hamiltonien de quasiparticules

Comme auparavant, on définit les opérateurs $b_{k,\sigma}$, de telle sorte que l'action d'un destructeur sur l'état HF donne zéro pour tout k par

$$\begin{pmatrix} a_{1,\uparrow} \\ a_{1,\downarrow} \\ a_{2,\uparrow} \\ a_{2,\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{1,\uparrow}^\dagger \\ b_{1,\downarrow}^\dagger \\ b_{2,\uparrow}^\dagger \\ b_{2,\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} a_{3,\uparrow} \\ a_{3,\downarrow} \\ a_{4,\uparrow} \\ a_{4,\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{3,\uparrow} \\ b_{3,\downarrow} \\ b_{4,\uparrow} \\ b_{4,\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (5.14)$$

Ainsi, l'hamiltonien se transforme comme

$$\begin{aligned}
H = \epsilon_0 &+ \sum_{\sigma} \left(\epsilon_4 \tilde{n}_{4\sigma} + \epsilon_3 \tilde{n}_{3\sigma} - \epsilon_2 \tilde{n}_{2\sigma} - \epsilon_1 \tilde{n}_{1\sigma} + \chi_1 \left(J_{1\sigma,4\sigma}^- + cc \right) \right) \\
&+ \chi_2 \left\{ (\tilde{n}_{1\uparrow} - \tilde{n}_{3\uparrow}) (\tilde{n}_{2\downarrow} - \tilde{n}_{4\downarrow}) + (\uparrow \leftrightarrow \downarrow) \right\} \\
&+ \chi_3 \left\{ \left(2 J_{1\uparrow,4\uparrow}^0 \right) \left(2 J_{1\downarrow,4\downarrow}^0 \right) - \left(J_{1\uparrow,4\uparrow}^- + cc \right) \left(J_{1\downarrow,4\downarrow}^- + cc \right) \right\} \\
&+ \chi_4 \left\{ \left\{ \left(2 J_{2\uparrow,3\uparrow}^0 \right) \left(J_{1\downarrow,4\downarrow}^- + cc \right) + \left(S_{3\uparrow,4\uparrow}^- + cc \right) \left(J_{2\downarrow,4\downarrow}^- + cc \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \left(S_{1\uparrow,2\uparrow}^- + cc \right) \left(J_{1\downarrow,3\downarrow}^- + cc \right) \right\} + \left\{ \uparrow \leftrightarrow \downarrow \right\} \right\} \\
&+ \chi_5 \left\{ \left[\left(2 J_{1\uparrow,4\uparrow}^0 \right) \left(J_{1\downarrow,4\downarrow}^- + cc \right) \right] + [\uparrow \leftrightarrow \downarrow] \right\} \\
&+ \chi_6 \left\{ \left[\left(2 J_{2\uparrow,3\uparrow}^0 \right) \left(2 J_{1\downarrow,4\downarrow}^0 \right) + \left(S_{1\uparrow,2\uparrow}^- + cc \right) \left(S_{3\downarrow,4\downarrow}^- + cc \right) \right] + [\uparrow \leftrightarrow \downarrow] \right\} \\
&+ \chi_7 \left\{ \left[\left(J_{1\uparrow,3\uparrow}^- + cc \right) \left(J_{2\downarrow,4\downarrow}^- + cc \right) \right] + [\uparrow \leftrightarrow \downarrow] \right\}, \tag{5.15}
\end{aligned}$$

Les coefficients qui figurent dans l'expression de l'hamiltonien (5.15) sont données, respectivement, par

$$\begin{aligned}
\epsilon_0 &= -4t \sin(2\vartheta) + U, & \epsilon_1 &= -2t \sin(2\vartheta) + \frac{U}{2}, \\
\epsilon_2 = \epsilon_3 = \chi_2 &= \frac{U}{2}, & \epsilon_4 &= 2t \sin(2\vartheta) + \frac{U}{2}, \\
\chi_1 &= -2t \cos(2\vartheta), & \chi_3 &= \frac{U}{4} \sin^2(2\vartheta), \\
\chi_4 &= \frac{U}{2} \sin(2\vartheta), & \chi_5 &= -\frac{U}{8} \sin(4\vartheta), \\
\chi_6 &= -\frac{U}{2} \sin^2(\vartheta), & \chi_7 &= -\frac{U}{2} \cos^2(\vartheta). \tag{5.16}
\end{aligned}$$

$$\tilde{n}_{k,\sigma} = b_{k,\sigma}^\dagger b_{k,\sigma}$$

densité de quasiparticules du mode (k, σ) ,

$$J_{p\sigma,h\sigma}^- = b_{h,\sigma} b_{p,\sigma}$$

opérateur d'annihilation d'une paire de quasiparticules ph ,

$$J_{p\sigma,h\sigma}^+ = b_{p,\sigma}^\dagger b_{h,\sigma}^\dagger$$

opérateur de création d'une paire de quasiparticules ph .

$$S_{l\sigma,l'\sigma}^+ = b_{l\sigma}^\dagger b_{l'\sigma}$$

avec $l > l'$

opérateur d'excitation avec deux indices soit de particule, soit de trou.

$$S_{l'\sigma,l\sigma}^- = \left(S_{l\sigma,l'\sigma}^+ \right)^\dagger$$

On peut réécrire l'hamiltonien en ordre normal afin d'extraire la partie HF comme suit

$$\begin{aligned}
H = & H_{HF} + \chi_2 \left\{ (\tilde{n}_{1\uparrow} - \tilde{n}_{3\uparrow}) (\tilde{n}_{2\downarrow} - \tilde{n}_{4\downarrow}) + (\uparrow \leftrightarrow \downarrow) \right\} \\
& + \chi_3 \left\{ (\tilde{n}_{1\uparrow} + \tilde{n}_{4\uparrow}) (\tilde{n}_{1\downarrow} + \tilde{n}_{4\downarrow}) - (J_{1\uparrow,4\uparrow}^- + cc) (J_{1\downarrow,4\downarrow}^- + cc) \right\} \\
& + \chi_4 \left\{ (\tilde{n}_{2\uparrow} + \tilde{n}_{3\uparrow}) (J_{1\downarrow,4\downarrow}^- + cc) + (S_{3\uparrow,4\uparrow}^- + cc) (J_{2\downarrow,4\downarrow}^- + cc) \right. \\
& \quad \left. + (S_{1\uparrow,2\uparrow}^- + cc) (J_{1\downarrow,3\downarrow}^- + cc) \right\} + \left\{ \uparrow \leftrightarrow \downarrow \right\} \\
& + \chi_5 \left\{ [(\tilde{n}_{1\uparrow} + \tilde{n}_{4\uparrow}) (J_{1\downarrow,4\downarrow}^- + cc)] + [\uparrow \leftrightarrow \downarrow] \right\} \\
& + \chi_6 \left\{ [(\tilde{n}_{2\uparrow} + \tilde{n}_{3\uparrow}) (\tilde{n}_{1\downarrow} + \tilde{n}_{4\downarrow}) + (S_{1\uparrow,2\uparrow}^- + cc) (S_{3\downarrow,4\downarrow}^- + cc)] + [\uparrow \leftrightarrow \downarrow] \right\} \\
& + \chi_7 \left\{ [(J_{1\uparrow,3\uparrow}^- + cc) (J_{2\downarrow,4\downarrow}^- + cc)] + [\uparrow \leftrightarrow \downarrow] \right\}, \tag{5.17}
\end{aligned}$$

avec

$$H_{HF} = E_{HF} + \sum_{\sigma} \left(e_4 \tilde{n}_{4\sigma} + e_3 \tilde{n}_{3\sigma} - e_2 \tilde{n}_{2\sigma} - e_1 \tilde{n}_{1\sigma} + (\chi_1 - \chi_4 - \chi_5) (J_{1\sigma,4\sigma}^- + cc) \right) \tag{5.18}$$

et l'énergie du fondamental et les énergies à une particule (des états de particules et de trous) de HF sont données respectivement par

$$\begin{aligned}
E_{HF} &= \epsilon_0 + \chi_3 + 2\chi_6, \\
e_{h1} &= \epsilon_1 + \chi_3 + \chi_6, & e_{h2} &= \epsilon_2 + \chi_6, \\
e_{p1} &= \epsilon_3 - \chi_6, & e_{p2} &= \epsilon_4 - \chi_3 - \chi_6. \tag{5.19}
\end{aligned}$$

A ce moment, on remarque que les énergies à une quasiparticule, représentées sur la figure (Fig.5.3), ne sont pas dégénérées. Ce qui laisse présager que l'approche s-RPA ou SCRPA s'effectuera sans problème. On vérifie aussi que l'équation de minimisation de l'énergie fondamentale HF est obtenue par la considération du terme non diagonale de l'hamiltonien HF (5.18) comme nul, c'est à dire, $(\chi_1 - \chi_4 - \chi_5) = 0$.

5.3 Réponse de charge et spin longitudinal

Comme d'habitude, dans cette voie, on considère un opérateur d'excitation RPA avec des composantes ph de même spin. En anticipation du résultat de cette étude, dans le cas " déformé " nous avons constaté que les corrélations qui sont induites par la RPA ou la SCRPA dans le fondamental sont extrêmement faibles. Nous commençons donc par les négliger, c'est à dire par l'approximation Tamm–Dancoff pour après pouvoir mesurer

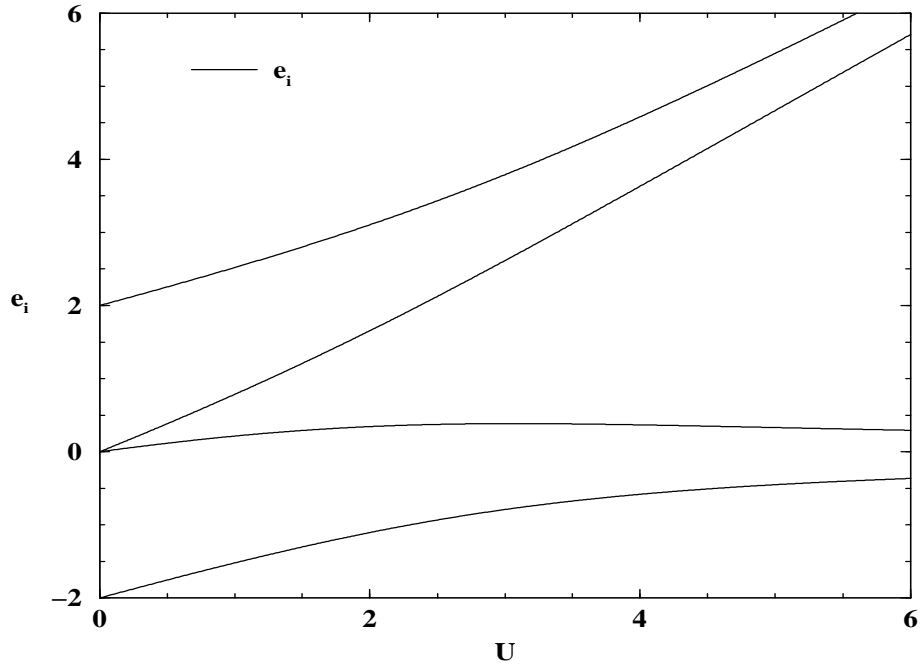


FIG. 5.3 – Spectre d'énergies HF à une quasiparticule en fonction de l'interaction U .

l'apport (très faible) des corrélations RPA. A la fin de ce chapitre, nous essayerons de donner une conclusion de ce constat un peu singulier concernant notre expérience avec la (SC)RPA.

5.3.1 Approximation Tamm-Dancoff

Dans l'approximation Tamm-Dancoff (TDA), la matrice \mathcal{B} qui figure dans le développement des équations RPA est posée nulle. Egalement, on calcule la valeur moyenne de chacun des éléments dans l'état HF. Les différentes valeurs moyennes des termes qui apparaissent dans la matrice, sont données par

$$\langle J_{ph,\uparrow}^{\pm} J_{p'h',\downarrow}^{\pm} \rangle = 0, \quad \langle J_{hp,\uparrow}^0 J_{h'p',\downarrow}^0 \rangle = \frac{1}{4}, \quad \langle J_{hp,\sigma}^0 \rangle = \frac{1}{2}.$$

La résolution de ce problème nous montre que le système d'équations se scinde en quatre sous matrices. Les états HF ont deux type de densité (5.12), une qui tend en fonction de U vers 1 (on l'appelle spin grand (g)) et l'autre tend vers 0 (on l'appelle spin petit (p)). On remarque que les excitations ph de spin grand-grand (les excitations 13 $\uparrow \equiv gg \uparrow$ et 24 $\downarrow \equiv gg \downarrow$) se découple du reste. De même, les excitations ph de spin petit-petit (les excitations 13 $\downarrow \equiv pp \downarrow$ et 24 $\uparrow \equiv pp \uparrow$) se découple du reste. Ainsi, le mélange de spin grand-petit se découple aussi en deux sous matrice: Une pour les excitations 14 $\uparrow \equiv gp \uparrow$

et $14 \downarrow \equiv pg \downarrow$ et une pour les excitations $23 \uparrow \equiv pg \uparrow$ et $23 \downarrow \equiv gp \downarrow$. Ceci est évidemment une simple conséquence de la conservation du spin.

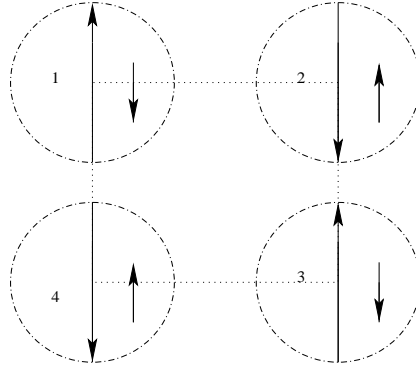


FIG. 5.4 – Représentation de la distribution de densités de spin sur chaque sites

Ainsi, la matrice \mathcal{A} dans l'approximation TDA se scinde en quatre sous-matrices de dimension 2×2 chacune:

– Relativement à l'opérateur d'excitation spin- gg

$$Q_{1\nu}^\dagger = \mathcal{X}_{1\uparrow,3\uparrow}^\nu K_{3\uparrow,1\uparrow}^+ + \mathcal{X}_{2\downarrow,4\downarrow}^\nu K_{4\downarrow,2\downarrow}^+ - \mathcal{Y}_{1\uparrow,3\uparrow}^\nu K_{1\uparrow,3\uparrow}^- - \mathcal{Y}_{2\downarrow,4\downarrow}^\nu K_{2\downarrow,4\downarrow}^- \quad (5.20)$$

ou l'opérateur d'excitation spin- pp

$$Q_{2\nu}^\dagger = \mathcal{X}_{1\downarrow,3\downarrow}^\nu K_{3\downarrow,1\downarrow}^+ + \mathcal{X}_{2\uparrow,4\uparrow}^\nu K_{4\uparrow,2\uparrow}^+ - \mathcal{Y}_{1\downarrow,3\downarrow}^\nu K_{1\downarrow,3\downarrow}^- - \mathcal{Y}_{2\uparrow,4\uparrow}^\nu K_{2\uparrow,4\uparrow}^-, \quad (5.21)$$

la matrice \mathcal{A}_1 s'écrit comme

$$\mathcal{A}_1 = \begin{pmatrix} e_3 - e_1 & \chi_7 \\ \chi_7 & e_4 - e_2 \end{pmatrix} \quad (5.22)$$

avec $e_3 - e_1 = e_4 - e_2$. Ceci nous donne les deux valeurs propres doublement dégénérées,

$$\mathcal{E}_{c1}^{TDA} = e_3 - e_1 - \chi_7, \quad \mathcal{E}_{c2}^{TDA} = e_3 - e_1 + \chi_7, \quad (5.23)$$

qu'on peut comparer à la solution exacte analytique \mathcal{E}_3^2 et \mathcal{E}_1^2 (voir annexe B.2.3), respectivement.

– Pour l'opérateur d'excitation spin- pg

$$Q_{3\nu}^\dagger = \mathcal{X}_{1\uparrow,4\uparrow}^\nu K_{4\uparrow,1\uparrow}^+ + \mathcal{X}_{1\downarrow,4\downarrow}^\nu K_{4\downarrow,1\downarrow}^+ - \mathcal{Y}_{1\uparrow,4\uparrow}^\nu K_{1\uparrow,4\uparrow}^- - \mathcal{Y}_{1\downarrow,4\downarrow}^\nu K_{1\downarrow,4\downarrow}^- \quad (5.24)$$

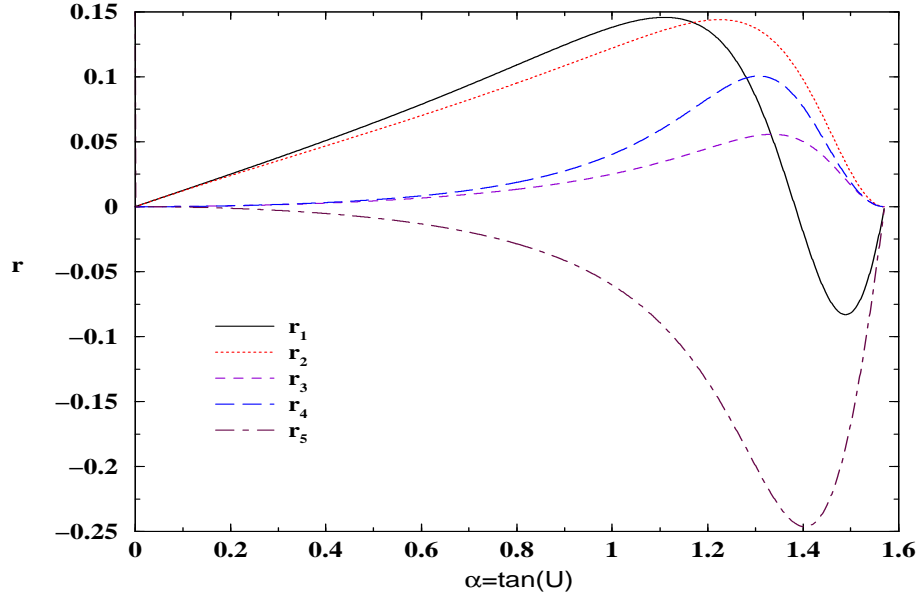


FIG. 5.5 – Les corrections apportées par la solution TDA par rapport à la solution exacte dans la réponse de charge. Les corrections sont définies comme $r_i = \frac{\mathcal{E}_i^{exact} - \mathcal{E}_i^{TDA}}{\mathcal{E}_i^{exact}}$ (cas à 4-sites avec une transformation HF générale).

la matrice \mathcal{A}_2 s'écrit comme

$$\mathcal{A}_2 = \begin{pmatrix} e_4 - e_1 & -\chi_3 \\ -\chi_3 & e_4 - e_1 \end{pmatrix}. \quad (5.25)$$

Ceci nous donne les deux valeurs propres non dégénérées,

$$\mathcal{E}_{c3}^{TDA} = e_4 - e_1 - \chi_3, \quad \mathcal{E}_{c4}^{TDA} = e_4 - e_1 + \chi_3. \quad (5.26)$$

qu'on peut comparer aussi à la solution exacte analytique \mathcal{E}_3^4 et \mathcal{E}_1^4 (voir annexe B.2.3), respectivement.

– Pour l'opérateur d'excitation spin-*gp*

$$Q_{4\nu}^\dagger = \mathcal{X}_{2\uparrow,3\uparrow}^\nu K_{3\uparrow,2\uparrow}^+ + \mathcal{X}_{2\downarrow,3\downarrow}^\nu K_{3\downarrow,2\downarrow}^+ - \mathcal{Y}_{2\uparrow,3\uparrow}^\nu K_{2\uparrow,3\uparrow}^- - \mathcal{Y}_{2\downarrow,3\downarrow}^\nu K_{2\downarrow,3\downarrow}^- \quad (5.27)$$

la matrice \mathcal{A}_3 s'écrit comme

$$\mathcal{A}_3 = \begin{pmatrix} e_3 - e_2 & 0 \\ 0 & e_3 - e_2 \end{pmatrix}, \quad (5.28)$$

Ceci nous donne la valeur propre doublement dégénérée,

$$\mathcal{E}_{c5}^{TDA} = e_3 - e_2, \quad (5.29)$$

qu'on peut comparer à la solution exacte analytique \mathcal{E}_3^0 (voir annexe B.2.3).

5.3.2 *ph*-RPA standard

Avec la RPA standard, on calcule la valeur moyenne de chaque élément des matrices \mathcal{A} et \mathcal{B} dans l'état HF. Comme l'évolution de taille de spin (c'est à dire qu'elle soit grand ou petit) est un "bon nombre quantique", les matrices s-RPA, \mathcal{A} et \mathcal{B} , se scindent en quatres sous-matrices de dimension 2×2 chacune de la même façon que TDA :

- Pour $Q_{1\nu}^\dagger$ et $Q_{2\nu}^\dagger$, la matrice \mathcal{A}_1 s'écrit comme

$$\mathcal{A}_1 = \begin{pmatrix} e_3 - e_1 & \chi_7 \\ \chi_7 & e_4 - e_2 \end{pmatrix} \quad (5.30)$$

avec $e_3 - e_1 = e_4 - e_2$ et la matrice \mathcal{B}_1 s'écrit comme

$$\mathcal{B}_1 = \begin{pmatrix} 0 & \chi_7 \\ \chi_7 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.31)$$

Ceci nous donne les deux valeurs propres doublement dégénérées,

$$\mathcal{E}_{c1}^{s-RPA} = (e_3 - e_1) \sqrt{1 - \frac{2\chi_7}{e_3 - e_1}}, \quad \mathcal{E}_{c2}^{s-RPA} = (e_3 - e_1) \sqrt{1 + \frac{2\chi_7}{e_3 - e_1}}, \quad (5.32)$$

qu'on peut comparer à la solution exacte \mathcal{E}_3^2 et \mathcal{E}_1^2 et TDA (5.23), respectivement. On remarque que les énergies Tamm-Dancoff sont obtenues par un développement à l'ordre 1 par rapport au terme $\delta_1 = \frac{2\chi_7}{e_3 - e_1} \ll 1$ (voir Fig.5.6). On voit bien sur cette figure, (Fig.5.6), que le terme δ_1 ne dépasse pas $\frac{1}{4}$ en valeur absolue. Ce qui explique bien que la s-RPA n'améliore pas la solution TDA comme on peut les voir aussi sur la figure (Fig.5.7) où on calcule la différence entre les énergies s-RPA et celles TDA correspondantes (C_1 et C_2). Cette différence ne dépasse pas 1% ce qui représente une très faible correction par rapport à la différence solution exacte-TDA (r_1 et r_2) qui est de l'ordre de 15% au maximum (voir Fig.5.5).

- Pour l'opérateur d'excitation $Q_{3\nu}^\dagger$, les deux matrices \mathcal{A}_2 et \mathcal{B}_2 sont de dimension 2×2 chacune. Ainsi, \mathcal{A}_2 s'écrit comme

$$\mathcal{A}_2 = \begin{pmatrix} e_4 - e_1 & -\chi_3 \\ -\chi_3 & e_4 - e_1 \end{pmatrix} \quad (5.33)$$

et la matrice \mathcal{B}_2 s'écrit comme

$$\mathcal{B}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -\chi_3 \\ -\chi_3 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.34)$$

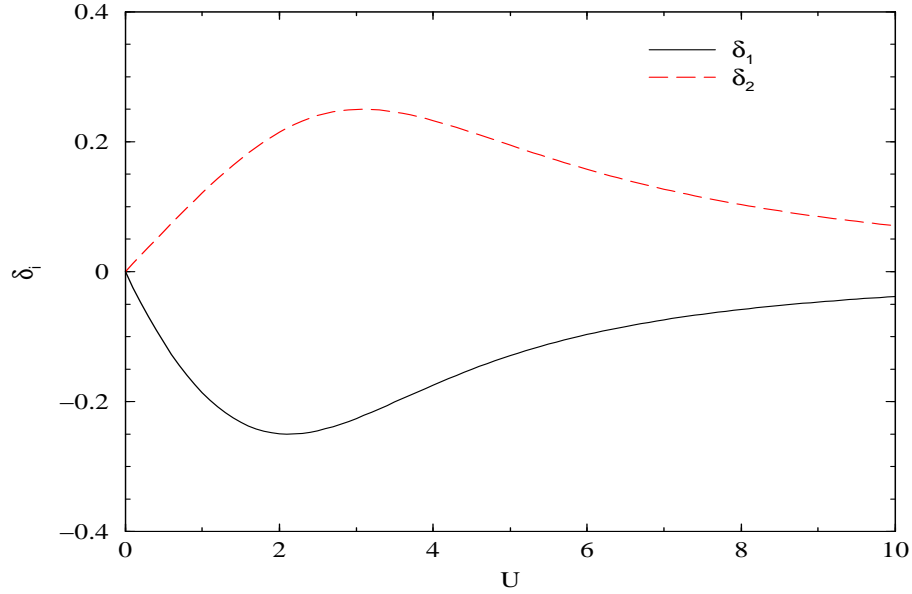


FIG. 5.6 – Variation des termes $\delta_1 = \frac{2\chi_7}{e_3 - e_1}$ et $\delta_2 = \frac{2\chi_3}{e_4 - e_1}$ en fonction de U , dans la réponse de charge (cas à 4-sites avec une transformation HF générale).

Ceci nous donne les deux valeurs propres non dégénérées,

$$\mathcal{E}_{c3}^{s-RPA} = (e_4 - e_1) \sqrt{1 - \frac{2\chi_3}{e_4 - e_1}}, \quad \mathcal{E}_{c4}^{s-RPA} = (e_4 - e_1) \sqrt{1 + \frac{2\chi_3}{e_4 - e_1}}. \quad (5.35)$$

qu'on peut comparer à la solution exacte \mathcal{E}_3^4 et \mathcal{E}_1^4 , respectivement. On remarque aussi que les énergies Tamm-Dancoff sont obtenues par un développement à l'ordre 1 par rapport au terme $\delta_2 = \frac{2\chi_3}{e_4 - e_1} \ll 1$ (voir Fig.5.6). De même, On remarque aussi que le terme δ_2 ne dépasse pas $\frac{1}{4}$. Ainsi, la différence entre les énergies s-RPA et celles TDA correspondantes (C_3 et C_4) ne dépasse pas 1% (Fig.5.7) ce qui représente une très faible correction par rapport à la différence solution exacte-TDA (r_3 et r_4) qui est de l'ordre de 15% au maximum (Fig.5.5).

- Pour l'opérateur d'excitation $Q_{4\nu}^\dagger$, les deux matrices \mathcal{A}_3 et \mathcal{B}_3 sont aussi de dimension 2×2 chacune. La matrice \mathcal{A}_3 s'écrit comme

$$\mathcal{A}_3 = \begin{pmatrix} e_3 - e_2 & 0 \\ 0 & e_3 - e_2 \end{pmatrix}, \quad (5.36)$$

et la matrice \mathcal{B}_3 est nulle, $\mathcal{B}_3 = 0$, c'est à dire dans ce cas la s-RPA se réduit carrément à la TDA ce qu'on a représenté sur la figure (Fig.5.7) par C_5 . Ceci nous donne la

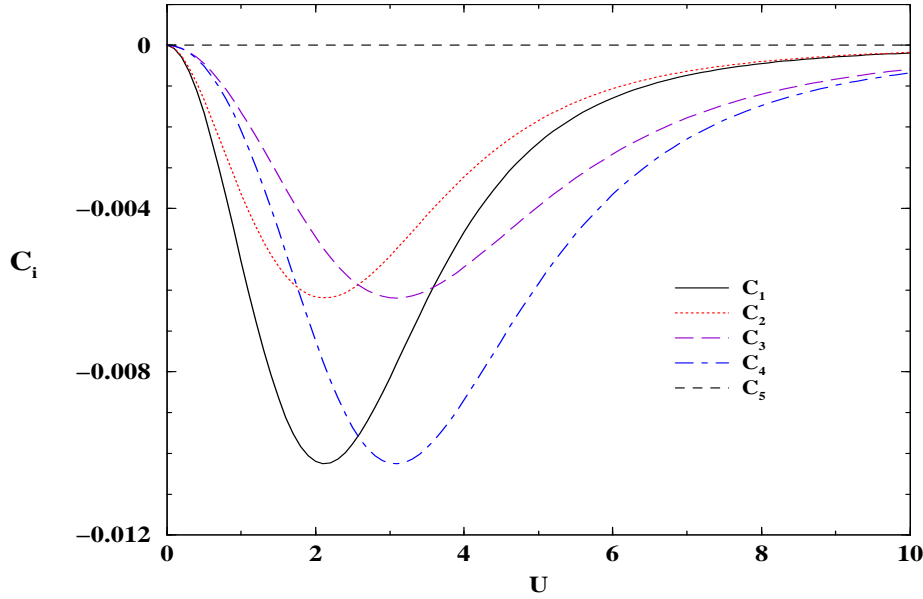


FIG. 5.7 – Les corrections apportées par la RPA standard par rapport à la solution Tamm-Dancoff dans la réponse de charge. Les corrections sont définies comme $C_i = \frac{\mathcal{E}_i^{s-RPA} - \mathcal{E}_i^{TDA}}{\mathcal{E}_i^{TDA}}$ (cas à 4-sites avec une transformation HF générale).

valeur propre doublement dégénérée,

$$\mathcal{E}_{c5}^{s-RPA} = \mathcal{E}_{c5}^{TD} = e_3 - e_2, \quad (5.37)$$

qu'on peut comparer à la solution exacte \mathcal{E}_3^0 . Ici, la s-RPA n'améliore pas du tout la solution TDA ce qu'on a représenté sur la figure (Fig.5.7) par C_5 . Bien que la différence exacte-TDA (r_5) est de l'ordre de 25% cette fois-ci (Fig.5.5).

Anisi, l'énergie du fondamental s-RPA est donnée (voir aussi Fig.5.10) par

$$E_{s-RPA} = E_{HF} - \sum_{\nu} \mathcal{E}_{\nu} \sum_{hp} |\mathcal{Y}_{hp}^{\nu}|^2 \quad (5.38)$$

$$= E_{HF} - \frac{1}{2} \text{tr}(\mathcal{A}) + \frac{1}{2} \sum_{\nu} \mathcal{E}_{\nu}. \quad (5.39)$$

On voit que la s-RPA donne une très faible amélioration par rapport à HF déformé.

5.3.3 *ph*-SCRPA

Comme d'habitude, nous suivons la même démarche pour fermer le système d'équations *ph*-SCRPA. Nous obtenons les résultats mentionnés sur les figures (Fig.5.8 et Fig.5.9)

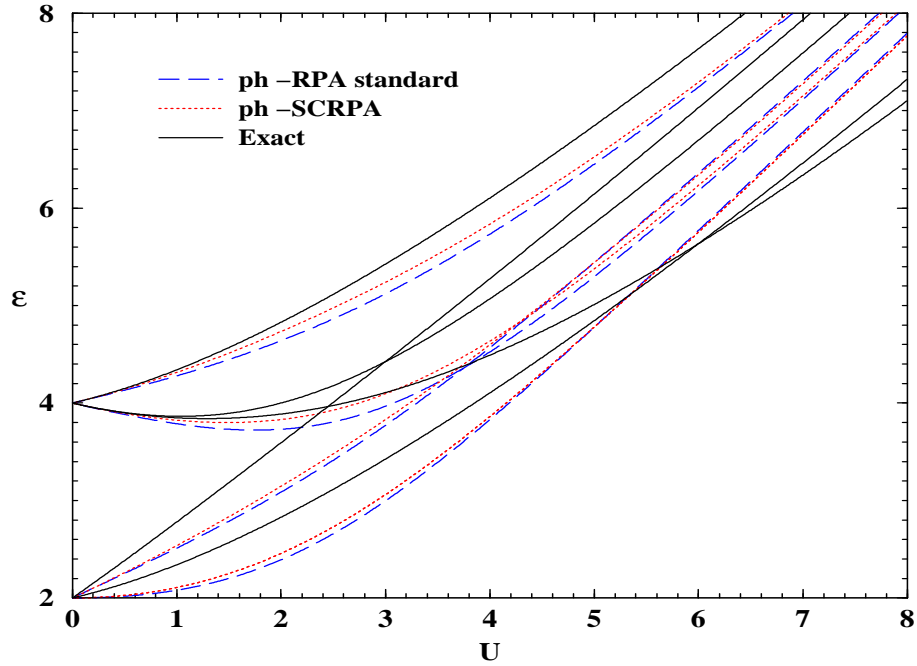


FIG. 5.8 – Comparaison du spectre ph -RPA et ph -SCRPA avec celui exact dans la réponse de charge (cas à 4-sites avec une transformation HF générale).

pour les énergies d'excitations. On s'aperçoit que la SCRPA n'améliore pas beaucoup la s-RPA. Ceci est dû au fait que les fonctions de corrélations de type $\langle J^\pm J^\pm \rangle$ sont extrêmement faibles. Nous avons aussi essayé de rajouter des composantes anormales (voir section 3.2.3). En dépit du fait qu'ici les équations ont pu être résolues, le résultat ne s'est pas beaucoup amélioré pour autant. Nous avons aussi regardé le canal du spin transverse mais nous avons dû faire le même constat que dans le canal de charge. De ce fait nous ne donnons pas de détails ici. En ce qui concerne l'énergie du fondamental, on doit sommer les voies de charge et de spin transverse. Le résultat est montré sur la figure (Fig.5.10). On voit que HF, s-RPA et SCRPA donnent des résultats très proches. Ils sont éloignés du résultat exact mais pas tant que ça ce qui montre que même le résultat exact ne contient pas beaucoup de corrélations au delà de HF déformé. Nous allons d'ailleurs démontrer maintenant que HF devient exact pour $U \rightarrow \infty$

5.4 Limite du couplage fort

En calculant la limite pour $U \rightarrow \infty$ des solutions s-RPA et exactes, on montre bien que la s-RPA reproduit le spectre exact. Ainsi, on a un bloc qui tend vers U lorsque $U \rightarrow \infty$

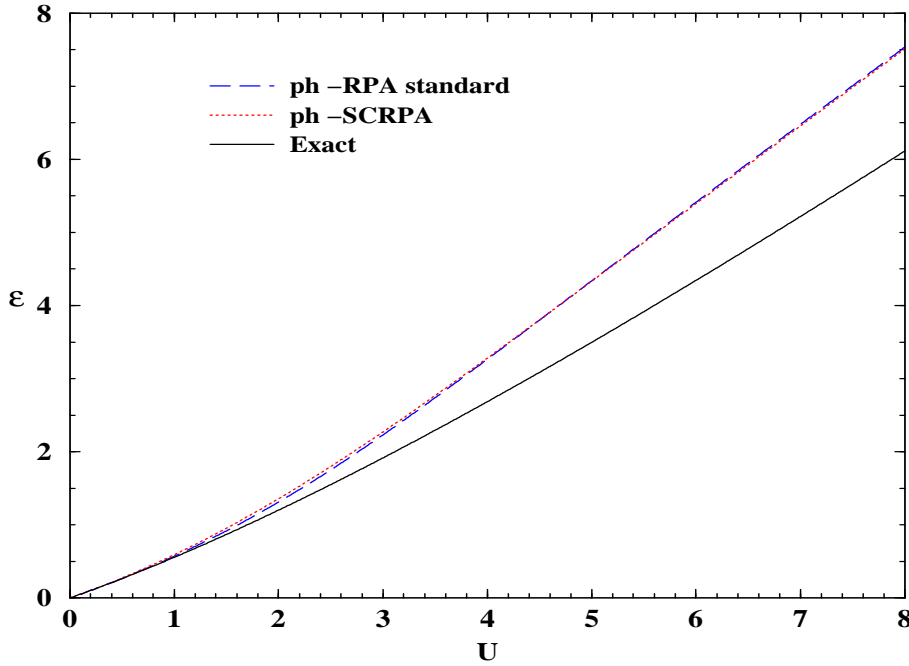


FIG. 5.9 – Comparaison du spectre *ph-RPA* et *ph-SCRPA* avec celui exact dans la réponse de charge (cas à 4-sites avec une transformation HF générale).

, tels que \mathcal{E}_{c1} , \mathcal{E}_{c2} (voir éq.5.32), \mathcal{E}_{c3} , \mathcal{E}_{c4} (voir éq.5.35) et \mathcal{E}_{c5} (voir éq.5.37). Même pour l'énergie fondamentale, les solutions HF et RPA reproduisent la solution exacte. En effet, pour la limite s-RPA, on calcule la pente des énergies lorsque $U \rightarrow \infty$,

$$\begin{aligned}
 \frac{\mathcal{E}_{c1}}{U} &\xrightarrow{U \rightarrow \infty} 1, & \frac{\mathcal{E}_{c2}}{U} &\xrightarrow{U \rightarrow \infty} 1, \\
 \frac{\mathcal{E}_{c3}}{U} &\xrightarrow{U \rightarrow \infty} 1, & \frac{\mathcal{E}_{c4}}{U} &\xrightarrow{U \rightarrow \infty} 1, \\
 \frac{\mathcal{E}_{c5}}{U} &\xrightarrow{U \rightarrow \infty} 1, & &
 \end{aligned} \tag{5.40}$$

qu'on peut le voir aussi lorsqu'on regarde les termes δ_1 et δ_2 sur la figure (Fig.5.6). Ces derniers montrent que la solution s-RPA tend vers la solution TDA. Pour la limite de la solution exacte (voir annexe B.2.3) des énergies correspondantes à celles de la TDA et s-RPA, nous donne les pentes, respectivement,

$$\begin{aligned}
 \frac{\mathcal{E}_3^2}{U} &\xrightarrow{U \rightarrow \infty} 1, & \frac{\mathcal{E}_1^2}{U} &\xrightarrow{U \rightarrow \infty} 1, \\
 \frac{\mathcal{E}_3^4}{U} &\xrightarrow{U \rightarrow \infty} 1, & \frac{\mathcal{E}_1^4}{U} &\xrightarrow{U \rightarrow \infty} 1, \\
 \frac{\mathcal{E}_3^0}{U} &\xrightarrow{U \rightarrow \infty} 1, & &
 \end{aligned} \tag{5.41}$$

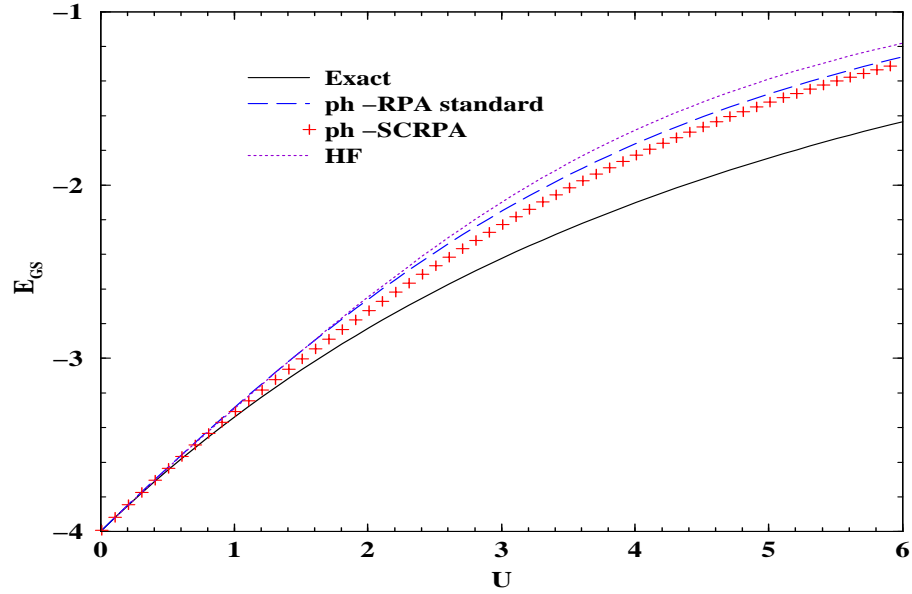


FIG. 5.10 – Comparaison de l'énergie fondamentale Hartree-Fock, *ph*-RPA standard et *ph*-SCRPA avec celle exacte (cas à 4-sites avec une transformation HF générale).

On peut conclure de tout ce qui précède qu'avec la RPA standard déformée et la TDA, on retrouve la solution exacte. Bien entendu, la SCRPA aussi reproduit la solution exacte. On peut dire qu'à la limite du couplage fort ($U \rightarrow \infty$), le modèle de Hubbard décrit un isolant antiferromagnétique où la densité des sites doublement occupés (deux électrons de spins opposés sur le même site) est très faible ou zéro. Ceci montre la localisation de chaque électron sur chaque site. Ainsi, l'énergie d'excitation qui tend vers ∞ montre l'impossibilité de déplacement des électrons librement dans un isolant.

5.5 Conclusion

Nous avons vu dans ce chapitre qu'en principe notre difficulté de résoudre RPA et SCRPA dans le cas à 4-sites pour $m_s = 0$ peut être levée lorsqu'on procède avec une transformation HF sans restriction. On a vu que pour toute valeur de U la solution HF se met spontanément dans un état d'aimantation antiferromagnétique non-nulle. Dans cette base qui constitue une brisure de symétrie discrète, donc sans mode de Goldstone, la solution de la RPA standard et SCRPA ne pose pas de problème, en principe. Cependant, il s'avère que les corrélations du type RPA dans le fondamental sont extrêmement faibles si bien que l'approximation TDA (en négligeant les "les corrélations dans le fondamental" c'est à dire

la matrice \mathcal{B} dans la RPA) est très bonne. De ce fait aussi la SCRPA n'apporte que des corrections minuscules à la TDA. Décidément l'ansatz RPA est ici inefficace et il faudrait probablement l'augmenter par des composantes à $2p-2h$ (voir discussion en Chap.). Nous devons donc avouer un échec avec notre SCRPA pour les 4-sites avec $m_s = 0$. Cependant, il faut dire que c'est une configuration assez particulière qui nécessite davantage de développement théorique.

Conclusion générale

Le but de ce travail de thèse était d'élaborer et de tester une méthode du problème à N -corps. Nous nous sommes intéressés notamment à l'application d'une généralisation de la RPA, la SCRPA, au modèle de Hubbard à une dimension et à un nombre de sites fini. La SCRPA est une extension de la RPA standard où on inclut les corrélations dans le fondamental d'une manière self consistante. Cette théorie a déjà fait ces preuves dans de multiples applications à différents types de modèles avec souvent d'excellents résultats. Ce fut le cas notamment pour le modèle d'appariement multicouches (modèle de Richardson), un travail que nous avons refait et présenté dans ce mémoire en chapitre (Chap.1). Une version simplifiée de la SCRPA, la RPA renormalisée (r-RPA) a même déjà été appliquée au modèle de Hubbard à la chaîne infinie [52] mais à cause des difficultés numériques le travail n'a pas pu être poussé jusqu'à la SCRPA complète et donc tout le potentiel de la théorie n'a pas pu être exploité. Par contre avec un nombre de sites fini, l'application complète de la SCRPA est tout à fait possible. Nous avons donc commencé avec le plus petit nombre de sites possible c'est à dire avec le cas à deux sites et 2-électrons et des conditions aux limites périodiques. C'est évidemment un cas de figure un peu trivial.

Néanmoins, l'application des méthodes du problème à N -corps à cet exemple simple est déjà assez révélatrice et riche en enseignements. Il semble évident que la RPA standard doit donner des résultats assez faux pour un système aussi petit et sans surprise, c'est effectivement le cas surtout proche d'une transition de phase au niveau de la théorie Hartree-Fock. Ce qui est plus surprenant c'est que des théories plus récentes et plus sophistiquées restent encore assez loin du compte. C'est notamment le cas avec l'ansatz de Gutzwiller dans sa version statique et dynamique [48], c'est aussi le cas avec l'approximation fréquemment utilisée GW [39] ainsi qu'avec la théorie proposée par Vilk et Tremblay [42, 43, 47]. Nous avons eu la bonne surprise que la SCRPA résout le problème à deux sites exactement pour toute valeur de U et ceci en restant dans la base des ondes planes. La SCRPA englobe donc deux cas limites correctement : la limite de deux particules et la limite de très fortes densités où la RPA standard devient exacte. On peut donc naturellement s'attendre à ce que la SCRPA interpole assez correctement dans les cas intermédiaires. Cependant, dans

un premier temps les choses ne se sont pas avérées aussi simples.

L'étape suivante de notre étude était naturellement le cas à quatre sites. Cependant, c'est un cas avec une dégénérescence au niveau HF qui engendre toute sorte d'instabilité au niveau RPA standard et SCRPA que nous avons pu maîtriser uniquement partiellement et avec des difficultés. Ceci nous a fait perdre pas mal de temps avant de directement franchir le pas pour les cas à six sites demi-plein, c'est à dire six -électrons. Dans ce cas, les deux premiers niveaux HF sont pleins et il n'y a pas de dégénérescence à ce niveau et l'application du formalisme SCRPA se fait correctement. Bien entendu, la SCRPA ne reproduit plus le résultat exact avec 6-électrons mais il s'est avéré que l'accord avec la solution exacte, que nous avons obtenu par diagonalisation directe, est à nouveau excellent. Ceci est vrai à la fois en ce qui concerne l'énergie du fondamental et les énergies d'excitations pour les différents moments de transfert possibles, tout comme pour les nombres d'occupations. A ce constat très satisfaisant et positif, il faut néanmoins rajouter quelques restrictions. Notons d'abord que nous avons travaillé dans la base des ondes planes, c'est à dire que nous avons imposé le maintien de l'invariance par translation où au niveau de HF-RPA standard, pour une valeur critique de $U = U_c$, se produit toujours une rupture de cette invariance et le système veut adopter une aimantation antiferromagnétique. La SCRPA se rapprochant fortement de la solution exacte peut rester dans la base des ondes planes pour des valeurs de U souvent (dépendant du transfert) bien au delà de U_c . Cependant, la transition de phase commence tôt ou tard à se faire sentir implicitement et le processus d'itération a du mal de converger à ce moment. Egaleme nt, contrairement à ce qui se passe pour les deux sites, les résultats commencent à se détériorer. Il faut donc constater que la SCRPA dans la base avec bonne symétrie donne d'excellents résultats mais uniquement pour un domaine de U limité. Ce domaine est généralement plus large que celui défini par l'approche HF-RPA standard dans la base avec bonne symétrie. On pourrait certainement dépasser ce domaine en développant l'approche SCRPA dans une base avec symétrie brisée, c'est à dire dans une base sans restriction. Ceci a été fait par d'autres auteurs dans d'autres modèles plus simples et par nous dans le chapitre 5 pour le cas critique (voir plus haut) des 4-sites. Il s'est avéré que le passage d'une base à une autre n'est pas toujours sans problème et il y a là probablement encore un certain travail au niveau du formalisme à accomplir. En tout cas, nous n'avons pas voulu nous lancer plus loin dans cette aventure dans la présente thèse.

Un deuxième point qu'il faut mentionner c'est que nous nous sommes restreint à considérer uniquement les configuration particule-trou et trou-particule qui sont déjà prise en compte dans la RPA standard. Cependant, comme les nombres d'occupations en SCRPA ne sont plus soit un, soit zéro il n'y aurait à priori pas de raison de ne pas in-

clure dans la SCRPA des configurations de types $a_p^\dagger a_{p'}$ ou $a_h^\dagger a_{h'}$, c'est à dire avec soit deux indices de particules, soit avec deux indices de trou. L'inclusion de ces termes a l'avantage certain que la règle de somme pondérée par l'énergie est automatiquement satisfaite aussi en SCRPA. Ceci entraîne que les lois de conservations sont satisfaites également. Cependant, l'inclusion de ces termes "anormaux" n'est pas sans problème. Les termes sont presque linéairement dépendants avec les autres et produisent donc dans la "matrice norme" des valeurs propres très petites. Ce fait nous a causé dans ce travail des problèmes numériques dans le sens que le processus d'itération ne convergeait plus très bien. Nous avons laissé tomber l'inclusion de ces termes et avons accepté une petite violation de la règle de somme pondérée par l'énergie. Il a été démontré par ailleurs dans un autre modèle par d'autres auteurs [53] que l'inclusion des termes "anormaux" n'influencerait que très peu le spectre déjà obtenu sans eux.

Résumons donc en bref les résultats principaux de notre travail: Le formalisme SCRPA dans la base des ondes planes résout le modèle de Hubbard à deux sites exactement. Par rapport à la RPA standard, ceci est dû à l'écrantage self consistant de l'interaction. Pour le cas à 6 -sites avec 6 -électrons, toujours en travaillant dans la base des ondes planes, nous avons dû faire une " petite " entrave au formalisme ce qui a entraîné une très légère violation de la règle de somme pondérée par l'énergie. Néanmoins, les résultats sont en excellent accord avec ceux de la diagonalisation exacte sur une plage de valeurs de U qui va à peu près, mais souvent bien au delà, jusqu'au point $U = U_c$ où l'approche HF dans la base des ondes planes devient instable. L'accord excellent concerne à la fois le fondamental et les états excités ainsi que les nombres d'occupations. Malheureusement, nous n'avons pas eu le temps dans cette thèse d'appliquer la SCRPA à un nombre beaucoup plus grand de sites et d'explorer les limites de la théorie. Une application extrêmement intéressante consisterait évidemment de choisir un réseau bidimensionnel. Cependant, pour que la théorie soit vraiment percutante, il faudra pouvoir couvrir toute la gamme des valeurs de U . A ce moment, il faut soit recouvrir à la SCRPA dans une base avec brisure de symétrie soit élargir l'opérateur RPA pour inclure des configurations de type $2p - 2h$. Nous voudrions également mentionner que la SCRPA peut tout à fait être généralisée à température finie. Ceci doit cependant rester des projets pour le futur.

Annexe A

Fonctions de corrélations

A.1 Fonctions de corrélations dans le canal ph

On donne les règles de commutations suivants qui seront utiles dans le calcul des fonctions de correlations dans le canal ph ,

$$\begin{aligned}
 [Q_\nu, Q_{\nu'}^\dagger] &= \sum_i \left(\mathcal{X}_i^\nu \mathcal{X}_i^{\nu'} - \mathcal{Y}_i^\nu \mathcal{Y}_i^{\nu'} \right) \frac{1 - M_i}{1 - \langle M_i \rangle}, \\
 [Q_\nu, Q_{\nu'}] &= \sum_i \left(\mathcal{Y}_i^\nu \mathcal{X}_i^{\nu'} - \mathcal{X}_i^\nu \mathcal{Y}_i^{\nu'} \right) \frac{1 - M_i}{1 - \langle M_i \rangle}, \\
 [M_i, Q_\nu] &= -2\mathcal{Y}_i^\nu \sum_{\nu_1} \left(\mathcal{X}_i^{\nu_1} Q_{\nu_1}^\dagger + \mathcal{Y}_i^{\nu_1} Q_{\nu_1} \right) \\
 [M_i, Q_\nu^\dagger] &= 2\mathcal{Y}_i^\nu \sum_{\nu_1} \left(\mathcal{Y}_i^{\nu_1} Q_{\nu_1}^\dagger + \mathcal{X}_i^{\nu_1} Q_{\nu_1} \right).
 \end{aligned} \tag{A.1}$$

Ainsi, on calcule les valeurs moyennes suivantes (On commute les destructeurs vers la droite)

$$\langle Q_{\nu_3} Q_{\nu_2}^\dagger Q_{\nu_1} Q_{\nu_0}^\dagger \rangle = \sum_{ij} \frac{(\mathcal{X}_i^{\nu_3} \mathcal{X}_i^{\nu_2} - \mathcal{Y}_i^{\nu_3} \mathcal{Y}_i^{\nu_2})}{(1 - \langle M_i \rangle)} \frac{(\mathcal{X}_j^{\nu_1} \mathcal{X}_j^{\nu_0} - \mathcal{Y}_j^{\nu_1} \mathcal{Y}_j^{\nu_0})}{(1 - \langle M_j \rangle)} \langle (1 - M_i)(1 - M_j) \rangle \tag{A.2}$$

$$\begin{aligned}
 \langle Q_{\nu_3} [Q_{\nu_1}, Q_{\nu_2}^\dagger] Q_{\nu_0}^\dagger \rangle &= \sum_{ij} \frac{(\mathcal{X}_i^{\nu_3} \mathcal{X}_i^{\nu_0} - \mathcal{Y}_i^{\nu_3} \mathcal{Y}_i^{\nu_0})}{(1 - \langle M_i \rangle)} \frac{(\mathcal{X}_j^{\nu_1} \mathcal{X}_j^{\nu_2} - \mathcal{Y}_j^{\nu_1} \mathcal{Y}_j^{\nu_2})}{(1 - \langle M_j \rangle)} \langle (1 - M_i)(1 - M_j) \rangle \\
 &\quad - 2 \sum_i \frac{\mathcal{X}_i^{\nu_3} \mathcal{X}_i^{\nu_2} \mathcal{X}_i^{\nu_1} \mathcal{X}_i^{\nu_0} - \mathcal{Y}_i^{\nu_3} \mathcal{Y}_i^{\nu_2} \mathcal{Y}_i^{\nu_1} \mathcal{Y}_i^{\nu_0}}{(1 - \langle M_i \rangle)}
 \end{aligned} \tag{A.3}$$

Finalement, on peut exprimer la fonction de corrélation en fonction des amplitudes RPA, $\langle M_i \rangle$ et de $\langle M_i M_j \rangle$ comme

$$\begin{aligned}
\langle Q_{\nu_3} Q_{\nu_1} Q_{\nu_2}^\dagger Q_{\nu_0}^\dagger \rangle &= \langle Q_{\nu_3} [Q_{\nu_1}, Q_{\nu_2}^\dagger] Q_{\nu_0}^\dagger \rangle + \langle Q_{\nu_3} Q_{\nu_2}^\dagger Q_{\nu_1} Q_{\nu_0}^\dagger \rangle \\
&= 2 \sum_{ij} \frac{(\mathcal{X}_i^{\nu_3} \mathcal{X}_i^{\nu_2} - \mathcal{Y}_i^{\nu_3} \mathcal{Y}_i^{\nu_2})}{(1 - \langle M_i \rangle)} \frac{(\mathcal{X}_j^{\nu_1} \mathcal{X}_j^{\nu_0} - \mathcal{Y}_j^{\nu_1} \mathcal{Y}_j^{\nu_0})}{(1 - \langle M_j \rangle)} \langle (1 - M_i)(1 - M_j) \rangle \\
&\quad + \sum_{ij} \frac{(\mathcal{X}_i^{\nu_3} \mathcal{X}_i^{\nu_0} - \mathcal{Y}_i^{\nu_3} \mathcal{Y}_i^{\nu_0})}{(1 - \langle M_i \rangle)} \frac{(\mathcal{X}_j^{\nu_1} \mathcal{X}_j^{\nu_2} - \mathcal{Y}_j^{\nu_1} \mathcal{Y}_j^{\nu_2})}{(1 - \langle M_j \rangle)} \langle (1 - M_i)(1 - M_j) \rangle \\
&\quad - 2 \sum_i \frac{\mathcal{X}_i^{\nu_3} \mathcal{X}_i^{\nu_2} \mathcal{X}_i^{\nu_1} \mathcal{X}_i^{\nu_0} - \mathcal{Y}_i^{\nu_3} \mathcal{Y}_i^{\nu_2} \mathcal{Y}_i^{\nu_1} \mathcal{Y}_i^{\nu_0}}{(1 - \langle M_i \rangle)}
\end{aligned} \tag{A.4}$$

A.2 Fonctions de corrélations dans le canal pp

On donne les commutateurs suivants dans le canal pp qui seront utiles dans le calcul des fonctions de corrélations,

$$\begin{aligned}
[R_\lambda, R_{\lambda'}^\dagger] &= - \sum_p \mathcal{Y}_p^\lambda \mathcal{Y}_p^{\lambda'} \frac{1 - M_p}{1 - \langle M_p \rangle} + \sum_h \mathcal{X}_h^\lambda \mathcal{X}_h^{\lambda'} \frac{1 - M_h}{1 - \langle M_h \rangle}, \\
[A_\nu, A_{\nu'}^\dagger] &= \sum_p \mathcal{X}_p^\nu \mathcal{X}_p^{\nu'} \frac{1 - M_p}{1 - \langle M_p \rangle} - \sum_h \mathcal{Y}_h^\nu \mathcal{Y}_h^{\nu'} \frac{1 - M_h}{1 - \langle M_h \rangle}, \\
[A_\nu, R_\lambda] &= - \sum_p \mathcal{X}_p^\nu \mathcal{Y}_p^\lambda \frac{1 - M_p}{1 - \langle M_p \rangle} + \sum_h \mathcal{Y}_h^\nu \mathcal{X}_h^\lambda \frac{1 - M_h}{1 - \langle M_h \rangle}, \\
[M_p, R_\lambda] &= -2\mathcal{Y}_p^\lambda \left(\sum_{\nu_1} \mathcal{X}_p^{\nu_1} A_{\nu_1}^\dagger + \sum_{\lambda_1} \mathcal{Y}_p^{\lambda_1} R_{\lambda_1} \right) \\
[M_h, A_\nu^\dagger] &= 2\mathcal{Y}_h^\nu \left(\sum_{\nu_1} \mathcal{Y}_p^{\nu_1} A_{\nu_1}^\dagger + \sum_{\lambda_1} \mathcal{X}_h^{\lambda_1} R_{\lambda_1} \right).
\end{aligned} \tag{A.5}$$

Ainsi,

$$\begin{aligned}
\langle R_\lambda R_{\lambda_2}^\dagger R_{\lambda_1} R_{\lambda'}^\dagger \rangle &= \sum_{p_1 p_2} \frac{\mathcal{Y}_{p_1}^\lambda \mathcal{Y}_{p_1}^{\lambda_2}}{(1 - \langle M_{p_1} \rangle)} \frac{\mathcal{Y}_{p_2}^{\lambda_1} \mathcal{Y}_{p_2}^{\lambda'}}{(1 - \langle M_{p_2} \rangle)} \langle (1 - M_{p_1})(1 - M_{p_2}) \rangle \\
&\quad - \sum_{p_1 h_1} \frac{\mathcal{Y}_{p_1}^\lambda \mathcal{Y}_{p_1}^{\lambda_2}}{(1 - \langle M_{p_1} \rangle)} \frac{\mathcal{X}_{h_1}^{\lambda_1} \mathcal{X}_{h_1}^{\lambda'}}{(1 - \langle M_{h_1} \rangle)} \langle (1 - M_{p_1})(1 - M_{h_1}) \rangle \\
&\quad - \sum_{p_1 h_1} \frac{\mathcal{Y}_{p_1}^{\lambda_1} \mathcal{Y}_{p_1}^{\lambda'}}{(1 - \langle M_{p_1} \rangle)} \frac{\mathcal{X}_{h_1}^\lambda \mathcal{X}_{h_1}^{\lambda_2}}{(1 - \langle M_{h_1} \rangle)} \langle (1 - M_{p_1})(1 - M_{h_1}) \rangle \\
&\quad + \sum_{h_1 h_2} \frac{\mathcal{X}_{h_1}^\lambda \mathcal{X}_{h_1}^{\lambda_2}}{(1 - \langle M_{h_1} \rangle)} \frac{\mathcal{X}_{h_2}^{\lambda_1} \mathcal{X}_{h_2}^{\lambda'}}{(1 - \langle M_{h_2} \rangle)} \langle (1 - M_{h_1})(1 - M_{h_2}) \rangle
\end{aligned} \tag{A.6}$$

$$\begin{aligned}
\langle R_\lambda [R_{\lambda_1}, R_{\lambda_2}^\dagger] R_{\lambda'}^\dagger \rangle = & 2 \sum_{p_1} \frac{\mathcal{Y}_{p_1}^{\lambda_1} \mathcal{Y}_{p_1}^{\lambda_2} \mathcal{Y}_{p_1}^\lambda \mathcal{Y}_{p_1}^{\lambda'}}{(1 - \langle M_{p_1} \rangle)} - 2 \sum_{h_1} \frac{\mathcal{X}_{h_1}^{\lambda_1} \mathcal{X}_{h_1}^{\lambda_2} \mathcal{X}_{h_1}^\lambda \mathcal{X}_{h_1}^{\lambda'}}{(1 - \langle M_{h_1} \rangle)} \\
& + \sum_{p_1 p_2} \frac{\mathcal{Y}_{p_1}^{\lambda_1} \mathcal{Y}_{p_1}^{\lambda_2}}{(1 - \langle M_{p_1} \rangle)} \frac{\mathcal{Y}_{p_2}^\lambda \mathcal{Y}_{p_2}^{\lambda'}}{(1 - \langle M_{p_2} \rangle)} \langle (1 - M_{p_1})(1 - M_{p_2}) \rangle \\
& - \sum_{p_1 h_1} \frac{\mathcal{Y}_{p_1}^{\lambda_1} \mathcal{Y}_{p_1}^{\lambda_2}}{(1 - \langle M_{p_1} \rangle)} \frac{\mathcal{X}_{h_1}^\lambda \mathcal{X}_{h_1}^{\lambda'}}{(1 - \langle M_{h_1} \rangle)} \langle (1 - M_{p_1})(1 - M_{h_1}) \rangle \quad (\text{A.7}) \\
& - \sum_{p_1 h_1} \frac{\mathcal{Y}_{p_1}^\lambda \mathcal{Y}_{p_1}^{\lambda'}}{(1 - \langle M_{p_1} \rangle)} \frac{\mathcal{X}_{h_1}^{\lambda_1} \mathcal{X}_{h_1}^{\lambda_2}}{(1 - \langle M_{h_1} \rangle)} \langle (1 - M_{p_1})(1 - M_{h_1}) \rangle \\
& + \sum_{h_1 h_2} \frac{\mathcal{X}_{h_1}^{\lambda_1} \mathcal{X}_{h_1}^{\lambda_2}}{(1 - \langle M_{h_1} \rangle)} \frac{\mathcal{X}_{h_2}^\lambda \mathcal{X}_{h_2}^{\lambda'}}{(1 - \langle M_{h_2} \rangle)} \langle (1 - M_{h_1})(1 - M_{h_2}) \rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle R_\lambda R_{\lambda_1} R_{\lambda_2}^\dagger R_{\lambda'}^\dagger \rangle &= \langle R_\lambda [R_{\lambda_1}, R_{\lambda_2}^\dagger] R_{\lambda'}^\dagger \rangle + \langle R_\lambda R_{\lambda_1}^\dagger R_{\lambda_2} R_{\lambda'}^\dagger \rangle \\
&= 2 \sum_{p_1} \frac{\mathcal{Y}_{p_1}^{\lambda_1} \mathcal{Y}_{p_1}^{\lambda_2} \mathcal{Y}_{p_1}^\lambda \mathcal{Y}_{p_1}^{\lambda'}}{(1 - \langle M_{p_1} \rangle)} - 2 \sum_{h_1} \frac{\mathcal{X}_{h_1}^{\lambda_1} \mathcal{X}_{h_1}^{\lambda_2} \mathcal{X}_{h_1}^\lambda \mathcal{X}_{h_1}^{\lambda'}}{(1 - \langle M_{h_1} \rangle)} \\
&+ \sum_{p_1 p_2} \frac{\mathcal{Y}_{p_1}^{\lambda_2} \mathcal{Y}_{p_2}^{\lambda'} (\mathcal{Y}_{p_1}^\lambda \mathcal{Y}_{p_2}^{\lambda_1} + \mathcal{Y}_{p_1}^{\lambda_1} \mathcal{Y}_{p_2}^\lambda)}{(1 - \langle M_{p_1} \rangle)(1 - \langle M_{p_2} \rangle)} \langle (1 - M_{p_1})(1 - M_{p_2}) \rangle \\
&- \sum_{p_1 h_1} \frac{(\mathcal{Y}_{p_1}^{\lambda_2} \mathcal{X}_{h_1}^{\lambda'} + \mathcal{Y}_{p_1}^{\lambda'} \mathcal{X}_{h_1}^{\lambda_2}) (\mathcal{Y}_{p_1}^{\lambda_1} \mathcal{X}_{h_1}^\lambda + \mathcal{Y}_{p_1}^\lambda \mathcal{X}_{h_1}^{\lambda_1})}{(1 - \langle M_{p_1} \rangle)(1 - \langle M_{h_1} \rangle)} \langle (1 - M_{p_1})(1 - M_{h_1}) \rangle \\
&+ \sum_{h_1 h_2} \frac{\mathcal{X}_{h_1}^{\lambda_2} \mathcal{X}_{h_2}^{\lambda'} (\mathcal{X}_{h_1}^{\lambda_1} \mathcal{X}_{h_2}^\lambda + \mathcal{X}_{h_1}^\lambda \mathcal{X}_{h_2}^{\lambda_1})}{(1 - \langle M_{h_1} \rangle)(1 - \langle M_{h_2} \rangle)} \langle (1 - M_{h_1})(1 - M_{h_2}) \rangle \quad (\text{A.8})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle A_\nu A_{\nu_1} A_{\nu_2}^\dagger A_{\nu'}^\dagger \rangle &= 2 \sum_{h_1} \frac{\mathcal{Y}_{h_1}^{\nu_1} \mathcal{Y}_{h_1}^{\nu_2} \mathcal{Y}_{h_1}^\nu \mathcal{Y}_{h_1}^{\nu'}}{(1 - \langle M_{h_1} \rangle)} - 2 \sum_{p_1} \frac{\mathcal{X}_{p_1}^{\nu_1} \mathcal{X}_{p_1}^{\nu_2} \mathcal{X}_{p_1}^\nu \mathcal{X}_{p_1}^{\nu'}}{(1 - \langle M_{p_1} \rangle)} \\
&+ \sum_{h_1 h_2} \frac{\mathcal{Y}_{h_1}^{\nu_2} \mathcal{Y}_{h_2}^{\nu'} (\mathcal{Y}_{h_1}^\nu \mathcal{Y}_{h_2}^{\nu_1} + \mathcal{Y}_{h_1}^{\nu_1} \mathcal{Y}_{h_2}^\nu)}{(1 - \langle M_{h_1} \rangle)(1 - \langle M_{h_2} \rangle)} \langle (1 - M_{h_1})(1 - M_{h_2}) \rangle \\
&- \sum_{p_1 h_1} \frac{(\mathcal{Y}_{h_1}^{\nu_2} \mathcal{X}_{p_1}^{\nu'} + \mathcal{Y}_{h_1}^{\nu'} \mathcal{X}_{p_1}^{\nu_2}) (\mathcal{Y}_{h_1}^{\nu_1} \mathcal{X}_{p_1}^\nu + \mathcal{Y}_{h_1}^\nu \mathcal{X}_{p_1}^{\nu_1})}{(1 - \langle M_{p_1} \rangle)(1 - \langle M_{h_1} \rangle)} \langle (1 - M_{p_1})(1 - M_{h_1}) \rangle \\
&+ \sum_{p_1 p_2} \frac{\mathcal{X}_{p_1}^{\nu_2} \mathcal{X}_{p_2}^{\nu'} (\mathcal{X}_{p_1}^{\nu_1} \mathcal{X}_{p_2}^\nu + \mathcal{X}_{p_1}^\nu \mathcal{X}_{p_2}^{\nu_1})}{(1 - \langle M_{p_1} \rangle)(1 - \langle M_{p_2} \rangle)} \langle (1 - M_{p_1})(1 - M_{p_2}) \rangle \quad (\text{A.9})
\end{aligned}$$

Annexe B

Solution exacte du modèle de Hubbard pour un nombre fini de sites

La solution exacte est obtenue par la diagonalisation exacte de l'hamiltonien de Hubbard que se soit dans la base réelle, dans la base des ondes planes ou dans la base déformée.

B.1 Solution exacte du modèle de Hubbard à 2-sites

B.1.1 Solution exacte dans la base réelle

On considère la base, $\{|p_1, p_2\rangle\}$ constituée par les 6 états possibles pour un nombre de sites, $N = 2$, et un nombre de particules, $\Omega = 2$:

$$\{|p_1, p_2\rangle\} = \{|\downarrow, \downarrow\rangle, |\uparrow, \uparrow\rangle, |2, 0\rangle, |\uparrow, \downarrow\rangle, |\downarrow, \uparrow\rangle, |0, 2\rangle\} \quad (\text{B.1})$$

La diagonalisation de l'hamiltonien de Hubbard dans cette base,

$$H = \begin{pmatrix} -2\mu & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2\mu & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & U - 2\mu & -t & -t & 0 \\ 0 & 0 & -t & -2\mu & 0 & -t \\ 0 & 0 & -t & 0 & -2\mu & -t \\ 0 & 0 & 0 & -t & -t & U - 2\mu \end{pmatrix}, \quad (\text{B.2})$$

nous donne les énergies propres exactes

$$\begin{aligned} E_0 &= -J - 2\mu & E_1 &= E_{1'} = E_{1''} = -2\mu \\ E_2 &= U - 2\mu & E_3 &= U + J - 2\mu, \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

et les états correspondants

$$\begin{aligned}
|0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{aligned} &- \sin(\phi)|2, 0\rangle + \cos(\phi)|\uparrow, \downarrow\rangle \\ &+ \cos(\phi)|\downarrow, \uparrow\rangle - \sin(\phi)|0, 2\rangle \end{aligned} \right\} \\
|1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{aligned} &|\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle \end{aligned} \right\} \\
|1'\rangle &= |\downarrow, \downarrow\rangle, & |1''\rangle &= |\uparrow, \uparrow\rangle \\
|2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{aligned} &|2, 0\rangle + |0, 2\rangle \end{aligned} \right\} \\
|3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{aligned} &\cos(\phi)|2, 0\rangle + \sin(\phi)|\uparrow, \downarrow\rangle \\ &+ \cos(\phi)|\downarrow, \uparrow\rangle + \sin(\phi)|0, 2\rangle \end{aligned} \right\}. \tag{B.4}
\end{aligned}$$

avec $J = \frac{8t^2}{\sqrt{16t^2+U^2}+U}$ et $\sin(2\phi) = \frac{4t}{\sqrt{16t^2+U^2}}$. Si on fixe le nombre de particule le potentiel chimique est constant, $\mu = cst$, qu'on peut le prendre égale à zéro. Ainsi, les énergies d'excitations exactes sont

$$\mathcal{E}_1 = J, \quad \mathcal{E}_2 = U - J, \quad \mathcal{E}_3 = U + 2J. \tag{B.5}$$

Dans la limite du couplage fort $U \rightarrow \infty$ les deux énergies \mathcal{E}_2 et \mathcal{E}_3 deviennent dégénérées et tendent vers U , par contre, l'énergie \mathcal{E}_1 devient dégénérée avec celle du fondamental. Ainsi, on peut interpréter notre système, comme un isolant pour U assez grande. L'énergie d'excitation nulle est expliquée par le fait qu'il y a un changement de site instantané par les deux électrons de spin opposés (voir les deux états correspondants qui sont un mélange de $|\uparrow, \downarrow\rangle$ et $|\downarrow, \uparrow\rangle$). Malgré qu'il y a une forte interaction coulombienne par site, les électrons peuvent se déplacer sur un réseau demi plein.

B.1.2 Solution exacte dans la base des ondes planes

- Pour $q = 0$, l'état excité est donné par

$$|\nu\rangle = \left(C_0^\nu + C_{\uparrow\downarrow}^\nu J_\uparrow^+ J_\downarrow^+ \right) |HF\rangle \tag{B.6}$$

ce qui nous donne la forme de l'hamiltonien dans cet sous-espace comme

$$H = \begin{pmatrix} -2t + U & -\frac{U}{2} \\ -\frac{U}{2} & 2t + U \end{pmatrix}, \tag{B.7}$$

et les énergies propres exactes

$$E_0 = \frac{1}{2} \left(U - \sqrt{16t^2 + U^2} \right) \quad E_3 = \frac{1}{2} \left(U + \sqrt{16t^2 + U^2} \right), \tag{B.8}$$

qui correspondent aux états suivants

$$\begin{aligned} |0\rangle &= \left(\cos(\phi) + \sin(\phi) J_{\uparrow}^+ J_{\downarrow}^+ \right) |HF\rangle \\ |3\rangle &= \left(-\sin(\phi) + \cos(\phi) J_{\uparrow}^+ J_{\downarrow}^+ \right) |HF\rangle \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

avec $tg(\phi) = \frac{U}{4t + \sqrt{16t^2 + U^2}}$.

- Pour $q = -\pi$, l'état excité est donné par

$$|\nu\rangle = \left(C_{\uparrow}^{\nu} J_{\uparrow}^+ + C_{\downarrow}^{\nu} J_{\downarrow}^+ \right) |HF\rangle \quad (\text{B.10})$$

ce qui nous donne la forme de l'hamiltonien dans cet sous-espace comme

$$H = \frac{U}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.11})$$

et les énergies propres exactes

$$E_1 = 0 \quad E_2 = U, \quad (\text{B.12})$$

qui correspondent aux états suivants

$$\begin{aligned} |1\rangle &= \frac{\sqrt{2}}{2} \left(J_{\uparrow}^+ + J_{\downarrow}^+ \right) |HF\rangle \\ |2\rangle &= \frac{\sqrt{2}}{2} \left(J_{\uparrow}^+ - J_{\downarrow}^+ \right) |HF\rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

B.2 Solution exacte du modèle de Hubbard à 4-sites

On définit l'état complètement général pour ce système (4-particules) comme

$$\begin{aligned} |\nu\rangle = & C_0^{\nu} |HF\rangle + \sum_{ph} C_{ph}^{\nu} b_p^{\dagger} b_h^{\dagger} |HF\rangle + \frac{1}{(2!)^2} \sum_{p1p2,h1h2} C_{p1p2,h1h2}^{\nu} b_{p1}^{\dagger} b_{p2}^{\dagger} b_{h1}^{\dagger} b_{h2}^{\dagger} |HF\rangle \\ & + \frac{1}{(3!)^2} \sum_{p1p2p3,h1h2h3} C_{p1p2p3,h1h2h3}^{\nu} b_{p1}^{\dagger} b_{p2}^{\dagger} b_{p3}^{\dagger} b_{h1}^{\dagger} b_{h2}^{\dagger} b_{h3}^{\dagger} |HF\rangle \\ & + \frac{1}{(4!)^2} \sum_{p1p2p3p4,h1h2h3h4} C_{p1p2p3p4,h1h2h3h4}^{\nu} b_{p1}^{\dagger} b_{p2}^{\dagger} b_{p3}^{\dagger} b_{p4}^{\dagger} b_{h1}^{\dagger} b_{h2}^{\dagger} b_{h3}^{\dagger} b_{h4}^{\dagger} |HF\rangle, \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

ainsi, on définit l'opérateur d'excitation comme un mélange de composantes ph (particule-trou), $2p-2h$ (2 particules - 2 trous), $3p-3h$ (3 particules - 3 trous) et $4p-4h$ (4 particules - 4 trous), respectivement,

$$\begin{aligned} J_{ph}^+ &= b_p^{\dagger} b_h^{\dagger}, & L_i^+ &= b_{p1}^{\dagger} b_{p2}^{\dagger} b_{h1}^{\dagger} b_{h2}^{\dagger}, \\ T_i^+ &= b_{p1}^{\dagger} b_{p2}^{\dagger} b_{p3}^{\dagger} b_{h1}^{\dagger} b_{h2}^{\dagger} b_{h3}^{\dagger}, & F_i^+ &= b_{p1}^{\dagger} b_{p2}^{\dagger} b_{p3}^{\dagger} b_{p4}^{\dagger} b_{h1}^{\dagger} b_{h2}^{\dagger} b_{h3}^{\dagger} b_{h4}^{\dagger}. \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

B.2.1 Solution exacte dans la base des ondes planes

Le vecteur d'onde de transfert, q , est un bon nombre quantique, ainsi l'espace de $m_s = 0$ se découple en quatre sous-espaces qui correspondent aux quatre valeurs de q .

Pour $q = -\frac{\pi}{2}$, l'opérateur d'excitation est donné par

$$Q_{1\nu}^\dagger = C_{31\uparrow}^\nu J_{31\uparrow}^+ + C_{42\downarrow}^\nu J_{42\downarrow}^+ + C_{l1}^\nu L_1^+ + C_{l2}^\nu L_2^+ + C_{l3}^\nu L_3^+ + C_{l4}^\nu L_4^+ + C_{t1}^\nu T_1^+ + C_{t2}^\nu T_2^+ \quad (\text{B.16})$$

avec

$$\begin{aligned} J_{31\uparrow}^+ &= b_{3\uparrow}^\dagger b_{1\uparrow}^\dagger, & J_{42\downarrow}^+ &= b_{4\downarrow}^\dagger b_{2\downarrow}^\dagger, \\ L_1^+ &= J_{42\uparrow}^+ J_{32\downarrow}^+, & L_2^+ &= J_{32\uparrow}^+ J_{31\downarrow}^+, \\ L_3^+ &= J_{41\uparrow}^+ J_{31\downarrow}^+, & L_4^+ &= J_{42\uparrow}^+ J_{41\downarrow}^+, \\ T_1^+ &= J_{31\uparrow}^+ J_{31\downarrow}^+ J_{42\downarrow}^+, & T_2^+ &= J_{31\uparrow}^+ J_{42\uparrow}^+ J_{42\downarrow}^+, \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

la matrice H_1 s'écrit comme

$$H_1 = \left(\begin{array}{cc|cc|cc|cc} p & h & 2p & - & 2h & & 3p & 3h \\ - & - & - & - & - & - & - & - \\ \alpha_1 & G & 0 & -G & G & 0 & 0 & G \\ G & \alpha_1 & G & 0 & 0 & -G & G & 0 \\ - & - & - & - & - & - & - & - \\ 0 & G & U & -G & G & 0 & 0 & G \\ -G & 0 & -G & \alpha_1 & 0 & G & -G & 0 \\ G & 0 & G & 0 & \alpha_2 & -G & G & 0 \\ 0 & -G & 0 & G & -G & \alpha_2 & 0 & -G \\ - & - & - & - & - & - & - & - \\ 0 & G & 0 & -G & G & 0 & \alpha_2 & G \\ G & 0 & G & 0 & 0 & -G & G & \alpha_2 \end{array} \right) \quad (\text{B.18})$$

avec $\alpha_1 = -2t + U$, $\alpha_2 = 2t + U$ et $G = \frac{U}{4}$.

Pour $q = \frac{\pi}{2}$, l'opérateur d'excitation est donné par

$$Q_{2\nu}^\dagger = C_{31\downarrow}^\nu J_{31\downarrow}^+ + C_{42\uparrow}^\nu J_{42\uparrow}^+ + C_{l5}^\nu L_5^+ + C_{l6}^\nu L_6^+ + C_{l7}^\nu L_7^+ + C_{l8}^\nu L_8^+ + C_{t3}^\nu T_3^+ + C_{t4}^\nu T_4^+ \quad (\text{B.19})$$

avec

$$\begin{aligned} J_{31\downarrow}^+ &= b_{3\downarrow}^\dagger b_{1\downarrow}^\dagger, & J_{42\uparrow}^+ &= b_{4\uparrow}^\dagger b_{2\uparrow}^\dagger, \\ L_5^+ &= J_{32\uparrow}^+ J_{42\downarrow}^+, & L_6^+ &= J_{31\uparrow}^+ J_{32\downarrow}^+, \\ L_7^+ &= J_{31\uparrow}^+ J_{41\downarrow}^+, & L_8^+ &= J_{41\uparrow}^+ J_{42\downarrow}^+, \\ T_3^+ &= J_{31\uparrow}^+ J_{42\uparrow}^+ J_{31\downarrow}^+, & T_4^+ &= J_{31\downarrow}^+ J_{42\downarrow}^+ J_{42\uparrow}^+, \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

la matrice H_2 s'écrit comme

$$H_2 = \begin{pmatrix} p & h & | & 2p & - & 2h & & | & 3p & 3h \\ - & - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ \alpha_1 & G & | & 0 & -G & G & 0 & | & 0 & G \\ G & \alpha_1 & | & G & 0 & 0 & -G & | & G & 0 \\ - & - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ 0 & G & | & U & -G & G & 0 & | & 0 & G \\ -G & 0 & | & -G & \alpha_1 & 0 & G & | & -G & 0 \\ G & 0 & | & G & 0 & \alpha_2 & -G & | & G & 0 \\ 0 & -G & | & 0 & G & -G & \alpha_2 & | & 0 & -G \\ - & - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ 0 & G & | & 0 & -G & G & 0 & | & \alpha_2 & G \\ G & 0 & | & G & 0 & 0 & -G & | & G & \alpha_2 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.21})$$

Pour $q = 0$, l'opérateur d'excitation est donné par

$$\begin{aligned} Q_{3\nu}^\dagger = & C_I^\nu I + C_{l9}^\nu L_9^+ + C_{l10}^\nu L_{10}^+ + C_{l11}^\nu L_{11}^+ + C_{l12}^\nu L_{12}^+ + C_{l13}^\nu L_{13}^+ + C_{l14}^\nu L_{14}^+ \\ & + C_{l15}^\nu L_{15}^+ + C_{l16}^\nu L_{16}^+ \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

avec

$$\begin{aligned} L_9^+ &= J_{31\uparrow}^+ J_{31\downarrow}^+, & L_{10}^+ &= J_{42\uparrow}^+ J_{42\downarrow}^+, & L_{11}^+ &= J_{32\uparrow}^+ J_{41\downarrow}^+, & L_{12}^+ &= J_{41\uparrow}^+ J_{32\downarrow}^+, \\ L_{13}^+ &= J_{41\uparrow}^+ J_{41\downarrow}^+, & L_{14}^+ &= J_{32\uparrow}^+ J_{32\downarrow}^+, & L_{15}^+ &= J_{31\uparrow}^+ J_{42\uparrow}^+, & L_{16}^+ &= J_{42\downarrow}^+ J_{31\downarrow}^+, \\ F^+ &= J_{41\uparrow}^+ J_{32\uparrow}^+ J_{41\downarrow}^+ J_{32\downarrow}^+, \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

la matrice H_3 s'écrit comme

$$H_3 = \left(\begin{array}{c|cccccccc|cccc} I & & & 2 & p & & & & 2 & h & & 4p-4h \\ \hline - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ E_{HF} & | & G & G & G & G & G & G & G & 0 & 0 & | & 0 \\ \hline - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ G & | & U & 0 & -G & -G & G & G & G & G & G & | & G \\ G & | & 0 & U & -G & -G & G & G & G & G & G & | & G \\ G & | & -G & -G & U & 0 & 0 & 0 & -G & -G & -G & | & G \\ G & | & -G & -G & 0 & U & 0 & 0 & -G & -G & -G & | & G \\ G & | & G & G & 0 & 0 & \alpha_2 & 0 & -G & -G & -G & | & G \\ G & | & G & G & 0 & 0 & 0 & E_{HF} & -G & -G & -G & | & G \\ 0 & | & G & G & -G & -G & -G & -G & U & 0 & 0 & | & 0 \\ 0 & | & G & G & -G & -G & -G & -G & 0 & U & 0 & | & 0 \\ \hline - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ 0 & | & G & G & G & G & G & G & G & 0 & 0 & | & \alpha_2 \end{array} \right). \quad (\text{B.24})$$

Pour $q = -\pi$, l'opérateur d'excitation est donné par

$$\begin{aligned} Q_{4\nu}^\dagger = & C_{32\uparrow}^\nu J_{32\uparrow}^+ + C_{32\downarrow}^\nu + C_{41\uparrow}^\nu J_{41\uparrow}^+ + C_{41\downarrow}^\nu J_{41\downarrow}^+ + C_{l15}^\nu L_{15}^+ + C_{l16}^\nu L_{16}^+ + C_{l17}^\nu L_{17}^+ \\ & + C_{l18}^\nu L_{18}^+ + C_{i7}^\nu T_7^+ + C_{i8}^\nu T_8^+ + C_f^\nu F^+ \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

avec

$$\begin{aligned} J_{32\downarrow}^+ &= b_{3\downarrow}^\dagger b_{2\downarrow}^\dagger, & J_{32\uparrow}^+ &= b_{3\uparrow}^\dagger b_{2\uparrow}^\dagger, & J_{41\downarrow}^+ &= b_{4\downarrow}^\dagger b_{1\downarrow}^\dagger, & J_{41\uparrow}^+ &= b_{4\uparrow}^\dagger b_{1\uparrow}^\dagger, \\ L_{17}^+ &= J_{42\uparrow}^+ J_{31\downarrow}^+, & L_{18}^+ &= J_{31\uparrow}^+ J_{42\downarrow}^+, & T_5^+ &= J_{31\uparrow}^+ J_{42\uparrow}^+ J_{41\downarrow}^+, & T_6^+ &= J_{31\downarrow}^+ J_{42\downarrow}^+ J_{41\uparrow}^+, \\ T_7^+ &= J_{31\uparrow}^+ J_{42\uparrow}^+ J_{32\downarrow}^+, & T_8^+ &= J_{31\downarrow}^+ J_{42\downarrow}^+ J_{32\uparrow}^+, \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

la matrice H_4 s'écrit comme

$$H_4 = \left(\begin{array}{cccc|cc|cc|cc} & p & h & & 2p & 2h & 3p & - & 3h & & \\ & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ E_{HF} & G & 0 & G & G & -G & -G & 0 & -G & 0 & \\ G & E_{HF} & G & 0 & -G & G & 0 & -G & 0 & -G & \\ 0 & G & U & G & -G & G & -G & 0 & -G & 0 & \\ G & 0 & G & U & G & -G & 0 & -G & 0 & -G & \\ & - & - & - & - & - & - & - & - & - & \\ G & -G & -G & G & U & 0 & G & -G & -G & G & \\ -G & G & G & -G & 0 & U & -G & G & G & -G & \\ & - & - & - & - & - & - & - & - & - & \\ -G & 0 & -G & 0 & G & -G & \alpha_3 & G & 0 & G & \\ 0 & -G & 0 & -G & -G & G & G & \alpha_3 & G & 0 & \\ -G & 0 & -G & 0 & -G & G & 0 & G & U & G & \\ 0 & -G & 0 & -G & G & -G & G & 0 & G & U & \end{array} \right) \quad (\text{B.27})$$

avec $\alpha_3 = 4t + U$.

Ainsi, la diagonalisation des ces matrices nous donne le spectre exact du modèle de Hubbard à 4-sites pour la projection de spin $m_s = 0$. Ceci nous permet donc de bien repérer et de comparer les spectres obtenus par différentes approximations pour chacun des transferts.

B.2.2 Solution exacte dans la base déformée

La résolution de ce problème nous montre que le système d'équations se scinde en quatre sous matrices. Les états HF ont deux type de densité (5.12), une qui tend vers 1 (on l'appelle spin grand (g)) et l'autre tend vers 0 (on l'appelle spin petit (p)). On remarque que les excitations ph de spin grand-grand (les excitations $13 \uparrow \equiv gg \uparrow$ et $24 \downarrow \equiv gg \downarrow$) se découple du reste. De même, les excitations ph de spin petit-petit (les excitations $13 \downarrow \equiv pp \downarrow$ et $24 \uparrow \equiv pp \uparrow$) se découple du reste. Ainsi, le mélange de spin grand-petit se découple aussi en deux sous matrice: Une pour les excitations $14 \uparrow \equiv gp \uparrow$ et $14 \downarrow \equiv pg \downarrow$ et une pour les excitations $23 \uparrow \equiv pg \uparrow$ et $23 \downarrow \equiv gp \downarrow$. Cette symétrie se conserve pour les opérateurs d'excitations qui sont composés par un nombre impair d'opérateurs d'excitations ph.

Pour l'opérateur d'excitation

$$Q_{1\nu}^\dagger = C_{31\uparrow}^\nu J_{31\uparrow}^+ + C_{42\downarrow}^\nu J_{42\downarrow}^+ + C_{11}^\nu L_1^+ + C_{12}^\nu L_2^+ + C_{13}^\nu L_3^+ + C_{14}^\nu L_4^+ + C_{t1}^\nu T_1^+ + C_{t2}^\nu T_2^+ \quad (\text{B.28})$$

avec

$$J_{31\uparrow}^+ = b_{3\uparrow}^\dagger b_{1\uparrow}^\dagger, \quad J_{42\downarrow}^+ = b_{4\downarrow}^\dagger b_{2\downarrow}^\dagger,$$

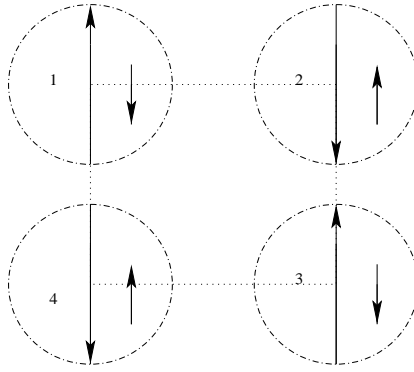


FIG. B.1 – Représentation de la distribution de densités de spin sur chaque sites

$$\begin{aligned}
L_1^+ &= J_{31\uparrow}^+ J_{41\downarrow}^+, & L_2^+ &= J_{42\uparrow}^+ J_{32\downarrow}^+, \\
L_3^+ &= J_{32\uparrow}^+ J_{31\downarrow}^+, & L_4^+ &= J_{41\uparrow}^+ J_{42\downarrow}^+, \\
T_1^+ &= J_{31\uparrow}^+ J_{42\uparrow}^+ J_{31\downarrow}^+, & T_2^+ &= J_{31\downarrow}^+ J_{42\downarrow}^+ J_{42\uparrow}^+,
\end{aligned} \tag{B.29}$$

la matrice \mathcal{H}_1 s'écrit comme

$$\mathcal{H}_1 = \begin{pmatrix} ph & & | & 2p & - & 2h & & | & 3p & 3h \\ \alpha_1 & \chi_7 & | & \chi_1 & 0 & \chi_4 & \chi_4 & | & \chi_7 & 0 \\ \chi_7 & \alpha_2 & | & \chi_4 & \chi_4 & 0 & \chi_1 & | & 0 & \chi_7 \\ - & - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ \chi_1 & \chi_4 & | & \alpha_{l1} & 0 & \chi_6 & \chi_6 & | & \chi_4 & 0 \\ 0 & \chi_4 & | & 0 & \alpha_{l2} & \chi_6 & \chi_6 & | & \chi_4 & -\chi_1 \\ \chi_4 & 0 & | & \chi_6 & \chi_6 & \alpha_{l3} & 0 & | & -\chi_1 & \chi_4 \\ \chi_4 & \chi_1 & | & \chi_6 & \chi_6 & 0 & \alpha_{l4} & | & 0 & \chi_4 \\ - & - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ \chi_7 & 0 & | & \chi_4 & \chi_4 & -\chi_1 & 0 & | & \alpha_{t1} & \chi_7 \\ 0 & \chi_7 & | & 0 & -\chi_1 & \chi_4 & \chi_4 & | & \chi_7 & \alpha_{t2} \end{pmatrix} \tag{B.30}$$

avec

$$\begin{aligned}
\alpha_1 &= \epsilon_3 - \epsilon_1 + \epsilon_0, & \alpha_2 &= \epsilon_4 - \epsilon_2 + \epsilon_0, & \alpha_{l1} &= \epsilon_4 + \epsilon_3 - 2\epsilon_1 + \epsilon_0, \\
\alpha_{l2} &= \epsilon_4 - \epsilon_2 + \epsilon_0, & \alpha_{l3} &= \epsilon_3 - \epsilon_1 + \epsilon_0, & \alpha_{l4} &= 2\epsilon_4 - \epsilon_2 - \epsilon_1 + \epsilon_0, \\
\alpha_{t1} &= \epsilon_4 - \epsilon_2 + 2(\epsilon_3 - \epsilon_1) + \epsilon_0, & \alpha_{t2} &= 2(\epsilon_4 - \epsilon_2) + \epsilon_3 - \epsilon_1 + \epsilon_0.
\end{aligned} \tag{B.31}$$

Pour l'opérateur d'excitation

$$Q_{2\nu}^\dagger = C_{31\downarrow}^\nu J_{31\downarrow}^+ + C_{42\uparrow}^\nu J_{42\uparrow}^+ + C_{l5}^\nu L_5^+ + C_{l6}^\nu L_6^+ + C_{l7}^\nu L_7^+ + C_{l8}^\nu L_8^+ + C_{t3}^\nu T_3^+ + C_{t4}^\nu T_4^+ \tag{B.32}$$

avec

$$\begin{aligned}
J_{31\downarrow}^+ &= b_{3\downarrow}^\dagger b_{1\downarrow}^\dagger, & J_{42\uparrow}^+ &= b_{4\uparrow}^\dagger b_{2\uparrow}^\dagger, \\
L_5^+ &= J_{41\uparrow}^+ J_{31\downarrow}^+, & L_6^+ &= J_{32\uparrow}^+ J_{42\downarrow}^+, \\
L_7^+ &= J_{31\uparrow}^+ J_{32\downarrow}^+, & L_8^+ &= J_{42\uparrow}^+ J_{41\downarrow}^+, \\
T_3^+ &= J_{31\uparrow}^+ J_{31\downarrow}^+ J_{42\downarrow}^+, & T_4^+ &= J_{31\uparrow}^+ J_{42\uparrow}^+ J_{42\downarrow}^+,
\end{aligned} \tag{B.33}$$

la matrice \mathcal{H}_2 s'écrit comme

$$\mathcal{H}_2 = \left(\begin{array}{cc|cc|cc|cc}
ph & & 2p & - & 2h & & 3p & 3h \\
\alpha_1 & \chi_7 & \chi_1 & 0 & \chi_4 & \chi_4 & \chi_7 & 0 \\
\chi_7 & \alpha_2 & \chi_4 & \chi_4 & 0 & \chi_1 & 0 & \chi_7 \\
- & - & - & - & - & - & - & - \\
\chi_1 & \chi_4 & \alpha_{l1} & 0 & \chi_6 & \chi_6 & \chi_4 & 0 \\
0 & \chi_4 & 0 & \alpha_{l2} & \chi_6 & \chi_6 & \chi_4 & -\chi_1 \\
\chi_4 & 0 & \chi_6 & \chi_6 & \alpha_{l3} & 0 & -\chi_1 & \chi_4 \\
\chi_4 & \chi_1 & \chi_6 & \chi_6 & 0 & \alpha_{l4} & 0 & \chi_4 \\
- & - & - & - & - & - & - & - \\
\chi_7 & 0 & \chi_4 & \chi_4 & -\chi_1 & 0 & \alpha_{t1} & \chi_7 \\
0 & \chi_7 & 0 & -\chi_1 & \chi_4 & \chi_4 & \chi_7 & \alpha_{t2}
\end{array} \right). \tag{B.34}$$

Pour l'opérateur d'excitation

$$\begin{aligned}
Q_{3\nu}^\dagger &= C_{32\uparrow}^\nu J_{32\uparrow}^+ + C_{32\downarrow}^\nu J_{32\downarrow}^+ + C_{l9}^\nu L_9^+ + C_{l10}^\nu L_{10}^+ + C_{l11}^\nu L_{11}^+ \\
&\quad + C_{l12}^\nu L_{12}^+ + C_{l13}^\nu L_{13}^+ + C_{l14}^\nu L_{14}^+ + C_{t5}^\nu T_5^+ + C_{t6}^\nu T_6^+
\end{aligned} \tag{B.35}$$

avec

$$\begin{aligned}
J_{32\downarrow}^+ &= b_{3\downarrow}^\dagger b_{2\downarrow}^\dagger, & J_{32\uparrow}^+ &= b_{3\uparrow}^\dagger b_{2\uparrow}^\dagger, & L_9^+ &= J_{31\uparrow}^+ J_{42\uparrow}^+, & L_{10}^+ &= J_{31\uparrow}^+ J_{31\downarrow}^+, \\
L_{11}^+ &= J_{42\uparrow}^+ J_{42\downarrow}^+, & L_{12}^+ &= J_{42\downarrow}^+ J_{31\downarrow}^+, & L_{13}^+ &= J_{32\uparrow}^+ J_{41\downarrow}^+, & L_{14}^+ &= J_{41\uparrow}^+ J_{32\downarrow}^+, \\
T_5^+ &= J_{31\uparrow}^+ J_{42\uparrow}^+ J_{41\downarrow}^+, & T_6^+ &= J_{31\downarrow}^+ J_{42\downarrow}^+ J_{41\uparrow}^+,
\end{aligned} \tag{B.36}$$

la matrice \mathcal{H}_3 s'écrit comme

$$\mathcal{H}_3 = \left(\begin{array}{ccc|ccc|ccc|ccc} ph & & & 2 & p & - & 2 & h & & & 3p & 3h \\ - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ \alpha_3 & 0 & | & 0 & \chi_4 & \chi_4 & 0 & 2\chi_4 & 0 & | & \chi_3 & 0 \\ 0 & \alpha_3 & | & 0 & \chi_4 & \chi_4 & \beta_1 & 0 & 2\chi_4 & | & 0 & \chi_3 \\ - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ 0 & 0 & | & \alpha_{l9} & \chi_7 & \chi_7 & 0 & \chi_3 & 0 & | & 2\chi_1 & 0 \\ \chi_4 & \chi_4 & | & \chi_7 & \alpha_{l10} & 0 & \chi_7 & \chi_6 & \chi_6 & | & \chi_4 & \chi_4 \\ \chi_4 & \chi_4 & | & \chi_7 & 0 & \alpha_{l11} & \chi_7 & \chi_6 & \chi_6 & | & \chi_4 & \chi_4 \\ 0 & 0 & | & 0 & \chi_7 & \chi_7 & \alpha_{l12} & 0 & \chi_3 & | & 0 & 2\chi_1 \\ 2\chi_4 & 0 & | & \chi_3 & \chi_6 & \chi_6 & 0 & \alpha_{l13} & 0 & | & 2\chi_5 & 0 \\ 0 & 2\chi_4 & | & 0 & \chi_6 & \chi_6 & \chi_3 & 0 & \alpha_{l14} & | & 0 & 2\chi_5 \\ - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ \chi_3 & 0 & | & 2\chi_1 & \chi_4 & \chi_4 & 0 & 2\chi_5 & 0 & | & \alpha_{t5} & 0 \\ 0 & \chi_3 & | & 0 & \chi_4 & \chi_4 & 2\chi_1 & 0 & 2\chi_5 & | & 0 & \alpha_{t6} \end{array} \right) \quad (\text{B.37})$$

avec

$$\begin{aligned} \alpha_3 &= \epsilon_0 + \chi_3, & \alpha_{l9} &= \epsilon_4 - \epsilon_1 + \epsilon_0 - \chi_3 - 2\chi_6, & \alpha_{l10} &= 2(\epsilon_3 - \epsilon_1) + \epsilon_0, \\ \alpha_{l11} &= 2(\epsilon_4 - \epsilon_2) + \epsilon_0, & \alpha_{l12} &= \alpha_{l9}, & \alpha_{l13} &= \alpha_{l9} + 2\chi_2, \\ \alpha_{l14} &= \alpha_{l13}, & \alpha_{t5} &= 2(\epsilon_4 - \epsilon_1) + \epsilon_0 + \chi_3, & \alpha_{t6} &= \alpha_{t5}, \end{aligned} \quad (\text{B.38})$$

Pour l'opérateur d'excitation

$$\begin{aligned} Q_{4\nu}^\dagger &= C_I^\nu I + C_{41\uparrow}^\nu J_{41\uparrow}^\dagger + C_{41\downarrow}^\nu J_{41\downarrow}^\dagger + C_{l15}^\nu L_{15}^\dagger + C_{l16}^\nu L_{16}^\dagger + C_{l17}^\nu L_{17}^\dagger \\ &\quad + C_{l18}^\nu L_{18}^\dagger + C_{t7}^\nu T_7^\dagger + C_{t8}^\nu T_8^\dagger + C_f^\nu F^\dagger \end{aligned} \quad (\text{B.39})$$

avec

$$\begin{aligned} J_{41\downarrow}^+ &= b_{4\downarrow}^\dagger b_{1\downarrow}^\dagger, & J_{41\uparrow}^+ &= b_{4\uparrow}^\dagger b_{1\uparrow}^\dagger, & L_{15}^+ &= J_{41\uparrow}^+ J_{41\downarrow}^+, & L_{16}^+ &= J_{42\uparrow}^+ J_{31\downarrow}^+, \\ L_{17}^+ &= J_{31\uparrow}^+ J_{42\downarrow}^+, & L_{18}^+ &= J_{32\uparrow}^+ J_{32\downarrow}^+, & T_7^+ &= J_{31\uparrow}^+ J_{42\uparrow}^+ J_{32\downarrow}^+, & T_8^+ &= J_{31\downarrow}^+ J_{42\downarrow}^+ J_{32\uparrow}^+, \\ F^+ &= J_{41\uparrow}^+ J_{32\uparrow}^+ J_{41\downarrow}^+ J_{32\downarrow}^+, \end{aligned} \quad (\text{B.40})$$

la matrice \mathcal{H}_4 s'écrit comme

$$\left(\begin{array}{c|cccc|cccc|cccc} |HF\rangle & & ph & & & 2p & - & 2h & & 3p & 3h & & 4p-4h \\ \hline - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ \hline \alpha_I & | & 0 & 0 & | & -\chi_3 & \chi_7 & \chi_7 & 0 & | & 0 & 0 & | & 0 \\ \hline 0 & | & \alpha_4 & -\chi_3 & | & 2\chi_5 & \chi_4 & \chi_4 & 0 & | & 0 & 0 & | & 0 \\ \hline 0 & | & -\chi_3 & \alpha_4 & | & 2\chi_5 & \chi_4 & \chi_4 & 0 & | & 0 & 0 & | & 0 \\ \hline - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ \hline -\chi_3 & | & 2\chi_5 & 2\chi_5 & | & \alpha_{l15} & \chi_6 & \chi_6 & 0 & | & 0 & 0 & | & 0 \\ \hline \chi_7 & | & \chi_4 & \chi_4 & | & \chi_6 & \alpha_{l16} & 0 & \chi_6 & | & \chi_4 & \chi_4 & | & \chi_7 \\ \hline \chi_7 & | & \chi_4 & \chi_4 & | & \chi_6 & 0 & \alpha_{l17} & \chi_6 & | & \chi_4 & \chi_4 & | & \chi_7 \\ \hline 0 & | & 0 & 0 & | & 0 & \chi_6 & \chi_6 & \alpha_{l18} & | & -2\chi_4 & -2\chi_4 & | & -\chi_3 \\ \hline - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ \hline 0 & | & 0 & 0 & | & 0 & \chi_4 & \chi_4 & -2\chi_4 & | & \alpha_{t7} & -\chi_3 & | & -2\chi_1 \\ \hline 0 & | & 0 & 0 & | & 0 & \chi_4 & \chi_4 & -2\chi_4 & | & -\chi_3 & \alpha_{t8} & | & -2\chi_1 \\ \hline - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ \hline 0 & | & 0 & 0 & | & 0 & \chi_7 & \chi_7 & -\chi_3 & | & -2\chi_1 & -2\chi_1 & | & \alpha_f \end{array} \right) \quad (\text{B.41})$$

avec

$$\begin{aligned} \alpha_I &= E_{HF} = \epsilon_0 + \chi_3 + 2\chi_6, & \alpha_4 &= \epsilon_4 - \epsilon_1 + \epsilon_0 - \chi_3, \\ \alpha_{l15} &= 2(\epsilon_4 - \epsilon_1) + \epsilon_0 + \chi_3 - 2\chi_6 - 2\chi_2 \\ \alpha_{l16} &= \alpha_{l15}, & \alpha_{l17} &= \epsilon_4 - \epsilon_1 + \epsilon_0, & \alpha_{l18} &= \epsilon_0 + \chi_3 - 2\chi_6 - 2\chi_2 \\ \alpha_{t7} &= \epsilon_4 - \epsilon_1 + \epsilon_0 - \chi_3, & \alpha_{t8} &= \alpha_{t7}, \\ \alpha_f &= 2(\epsilon_4 - \epsilon_1) + \epsilon_0 + \chi_3 + 2\chi_6, \end{aligned} \quad (\text{B.42})$$

B.2.3 Solution exacte analytique du modèle de Hubbard à 4-sites

La solution exacte est donnée par Schumann [54] pour un nombre d'électrons $\Omega = 4$. Ainsi, l'énergie de l'état fondamental correspond au canal $m_s = 0$ et est donnée par

$$E_0 = U - \frac{2}{\sqrt{3}} \sqrt{16t^2 + U^2} \cos\left(\frac{\beta}{3}\right), \quad (\text{B.43})$$

et les énergies des premiers états excités sont données comme

– pour $m_s = 0$, $r = 0$ et $S = 0$

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_1^0 &= U - \frac{2}{\sqrt{3}} \sqrt{16t^2 + U^2} \cos\left(\frac{\pi - \beta}{3}\right) - E_0 \\ \mathcal{E}_1^2 &= -2t + U - E_0 \quad \quad \quad 2\text{-fois} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_1^4 &= U - \frac{2}{\sqrt{3}} \sqrt{16t^2 + U^2} \cos\left(\frac{\pi + \beta}{3}\right) - E_0 \\ \mathcal{E}_2^4 &= U + \frac{2}{\sqrt{3}} \sqrt{16t^2 + U^2} \cos\left(\frac{\pi + \beta}{3}\right) - E_0,\end{aligned}\quad (\text{B.44})$$

avec

$$\beta = \arccos \frac{12\sqrt{3}t^2U}{(16t^2 + U^2)^{\frac{3}{2}}} \xrightarrow{U \rightarrow 0} \frac{\pi}{2}.\quad (\text{B.45})$$

– Pour $m_s = 0$, $r = 0$ et $S = 1$ sont données par

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_2^0 &= \frac{2U}{3} - \frac{2}{3} \sqrt{48t^2 + U^2} \cos\left(\frac{\pi - \alpha}{3}\right) - E_0 \\ \mathcal{E}_2^2 &= \frac{U}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{16t^2 + U^2} - E_0 \quad \text{2-fois} \\ \mathcal{E}_3^4 &= U - E_0 \quad \text{2-fois} \\ \mathcal{E}_4^4 &= \frac{2U}{3} - \frac{2}{3} \sqrt{48t^2 + U^2} \cos\left(\frac{\pi + \alpha}{3}\right) - E_0\end{aligned}\quad (\text{B.46})$$

avec

$$\alpha = \arccos \frac{36t^2U - U^3}{27\left(\frac{16t^2}{3} + \frac{U^2}{9}\right)^{\frac{3}{2}}} \xrightarrow{U \rightarrow 0} \frac{\pi}{2}.\quad (\text{B.47})$$

– Pour $m_s = 0$, $r = 0$ et $S = 2$ sont données par

$$\mathcal{E}_5^4 = -E_0 \quad (\text{B.48})$$

– Pour $m_s = 0$, $r = 1$ et $S = 0$ sont données par

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_3^0 &= \frac{4U}{3} - \frac{2}{3} \sqrt{48t^2 + U^2} \cos\left(\frac{\alpha}{3}\right) - E_0 \\ \mathcal{E}_3^2 &= \frac{3U}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{16t^2 + U^2} - E_0 \quad \text{2-fois} \\ \mathcal{E}_6^4 &= \frac{4U}{3} + \frac{2}{3} \sqrt{48t^2 + U^2} \cos\left(\frac{\pi + \alpha}{3}\right) - E_0 \\ \mathcal{E}_7^4 &= \mathcal{E}_3^4\end{aligned}\quad (\text{B.49})$$

– Pour $m_s = 0$, $r = 1$ et $S = 1$ sont données par

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_4^2 &= \mathcal{E}_1^2 \quad \text{2-fois} \\ \mathcal{E}_8^4 &= \mathcal{E}_3^4 \quad \text{2-fois}\end{aligned}\quad (\text{B.50})$$

Pour $m_s = 0$, $r = 2$ et $S = 0$ sont données par

$$\mathcal{E}_9^4 = 2U - E_0 \quad (\text{B.51})$$

– Pour $m_s = \pm 1$, $r = 0$ et $S = 1$ sont données par

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_4^0 &= \mathcal{E}_2^0 \\ \mathcal{E}_5^2 &= \mathcal{E}_2^2 && \text{2-fois} \\ \mathcal{E}_{10}^4 &= \mathcal{E}_3^4 && \text{2-fois} \\ \mathcal{E}_{11}^4 &= \mathcal{E}_4^4\end{aligned}\tag{B.52}$$

– Pour $m_s = \pm 1$, $r = 0$ et $S = 2$ sont données par

$$\mathcal{E}_{12}^4 = \mathcal{E}_5^4\tag{B.53}$$

Pour $m_s = \pm 1$, $r = 1$ et $S = 1$ sont données par

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_6^2 &= \mathcal{E}_1^2 && \text{2-fois} \\ \mathcal{E}_{13}^4 &= \mathcal{E}_3^4 && \text{2-fois}\end{aligned}\tag{B.54}$$

– Pour $m_s = \pm 2$, $r = 0$ et $S = 2$ sont données par

$$\mathcal{E}_{14}^4 = \mathcal{E}_5^4\tag{B.55}$$

B.3 Solution exacte du modèle de Hubbard à 6-sites

Tout d'abord, on commence par la construction de la base dans la quelle on peut dénombrer tous les états possibles du système afin d'exprimer l'hamiltonien dans cette base. Pour ce fait, on classe les états possibles d'un électron sur les différents sites $1 \uparrow, 1 \downarrow, 2 \uparrow, 2 \downarrow, \dots, N \uparrow, N \downarrow$ par un indice $i = 1, 2, 3, 4, \dots, 2N - 1, 2N$ (N est le nombre de sites). Ainsi, on peut exprimer l'hamiltonien du système (2.1) comme

$$H = -t \sum_{i=1}^{2N} (c_i^\dagger c_{i+2} + cc) + U \sum_{i=1}^N \hat{n}_{2i-1} \hat{n}_{2i} .\tag{B.56}$$

Il faut remarquer que les indices $2N + 1$ et $2N + 2$ sont équivalents aux indices 1 et 2 pour une chaine fermée. Avec cette nomenclature, on définit un état complètement général pour le système à 6-sites demi-pleins comme

$$|\nu\rangle = c_i^\dagger c_j^\dagger c_k^\dagger c_l^\dagger c_m^\dagger c_n^\dagger |-\rangle .\tag{B.57}$$

En plus, on a la projection de spin qu'est un bon nombre quantique c'est à dire pour 6-particules fermionique de spin- $\frac{1}{2}$ on a les valeurs de $m_s = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$ pour un spin total $S = 0, 1, 2, 3$. De ce fait, l'hamiltonien se scinde en des sous-matrices pour chaque

valeur de m_s . On projete l'hamiltonien (B.56) sur les états $|\nu\rangle$ qui, eux, forment une base orthonormée complète dans le sous-espace $m_s = 0$. Ainsi, on se retrouve avec une matrice 400×400 pour $m_s = 0$, qu'on doit diagonaliser numériquement. De même, on peut aussi calculer les nombres d'occupations exactes pour chaque mode $k\sigma$. Ainsi, la valeur moyenne dans l'état fondamental de $\hat{n}_{k\sigma}$ est donnée par la diagonalisation de la matrice $\langle 0 | c_p^\dagger c_{p'} | 0 \rangle$,

$$\langle 0 | c_p^\dagger c_{p'} | 0 \rangle = \sum_{\nu, \nu'} C_\nu^0 C_{\nu'}^{0*} \langle \nu' | c_p^\dagger c_{p'} | \nu \rangle \quad (\text{B.58})$$

et l'élément de matrice, $\langle \nu' | c_p^\dagger c_{p'} | \nu \rangle$, est donné par

$$\begin{aligned} \langle \nu' | c_p^\dagger c_{p'} | \nu \rangle &= \delta_{pp'} \begin{vmatrix} \delta_{nn'} & \delta_{mn'} & \delta_{ln'} & \delta_{kn'} & \delta_{jn'} & \delta_{in'} \\ \delta_{nm'} & \delta_{mm'} & \delta_{lm'} & \delta_{km'} & \delta_{jm'} & \delta_{im'} \\ \delta_{nl'} & \delta_{ml'} & \delta_{ll'} & \delta_{kl'} & \delta_{jl'} & \delta_{il'} \\ \delta_{nk'} & \delta_{mk'} & \delta_{lk'} & \delta_{kk'} & \delta_{jk'} & \delta_{ik'} \\ \delta_{nj'} & \delta_{mj'} & \delta_{lj'} & \delta_{kj'} & \delta_{jj'} & \delta_{ij'} \\ \delta_{ni'} & \delta_{mi'} & \delta_{li'} & \delta_{ki'} & \delta_{ji'} & \delta_{ii'} \end{vmatrix} \\ &- \begin{vmatrix} \delta_{nn'} & \delta_{mn'} & \delta_{ln'} & \delta_{kn'} & \delta_{jn'} & \delta_{in'} & \delta_{pn'} \\ \delta_{nm'} & \delta_{mm'} & \delta_{lm'} & \delta_{km'} & \delta_{jm'} & \delta_{im'} & \delta_{pm'} \\ \delta_{nl'} & \delta_{ml'} & \delta_{ll'} & \delta_{kl'} & \delta_{jl'} & \delta_{il'} & \delta_{pl'} \\ \delta_{nk'} & \delta_{mk'} & \delta_{lk'} & \delta_{kk'} & \delta_{jk'} & \delta_{ik'} & \delta_{pk'} \\ \delta_{nj'} & \delta_{mj'} & \delta_{lj'} & \delta_{kj'} & \delta_{jj'} & \delta_{ij'} & \delta_{pj'} \\ \delta_{ni'} & \delta_{mi'} & \delta_{li'} & \delta_{ki'} & \delta_{ji'} & \delta_{ii'} & \delta_{pi'} \\ \delta_{np'} & \delta_{mp'} & \delta_{lp'} & \delta_{kp'} & \delta_{jp'} & \delta_{ip'} & \delta_{pp'} \end{vmatrix} . \end{aligned} \quad (\text{B.59})$$

Bibliographie

- [1] J.P. Blaizot, G. Ripka, *Quantum Theory of Finite Systems*, The MIT Press, Cambridge, 1986.
- [2] P. Ring, P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem*, Springer, Berlin 1980.
- [3] P. Nozières, D. Pines, *The Theory of Quantum Liquids: Normal Fermi Liquids*, Addison-Wesley (1989).
- [4] D. J. Rowe, *Nuclear Collective Motion*, Methuen, London (1970).
- [5] G.D. Mahan, *Many-Particle Physics*, Plenum Press, New York (1981).
- [6] K. Hara, Prog. Theo. Phys. **32** (1964) 88.
- [7] D. J. Rowe, Rev. Mod. Phys. **40** (1968) 153; D. J. Rowe, Phys. Rev. **175** (1968) 1283.
- [8] P. Schuck, Z. Physik **241** (1971) 395.
- [9] P. Schuck, S. Ethofer, Nucl. Phys. **A 212** (1973) 269.
- [10] J. Dukelsky and P. Schuck, Nucl. Phys. **A 512** (1990) 466.
- [11] G. Röpke, Z. Phys. **B 99** (1995) 83 and references therein.
- [12] J. Dukelsky, P. Schuck, Phys. Lett. **B 387** (1996) 233.
- [13] J. Dukelsky, G. Röpke, P. Schuck, Nucl. Phys. **A 628** (1998) 17.
- [14] J. Dukelsky and P. Schuck, Rev. Mex. Fis. **44** Supl. 2 (1998) 55.
- [15] J. Dukelsky and P. Schuck, Mod. Phys. Lett. **6** No. 26 (1991) 2429.
- [16] J. Dukelsky, C. Esebbag, and P. Schuck, Phys. Rev. Lett. **87** (2001) 066403.
- [17] M. Baranger, Phys. Rev. **120** (1960) 957.
- [18] A.L. Fetter, J.D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, McGraw-Hill, Inc. (1971).
- [19] J. Dukelsky and P. Schuck, Phys. Lett. **464** (1999) 164.
- [20] L.M. Roth, Phys. Rev. **184** 451 (1969).
- [21] J. Dukelsky, J.G. Hirsch, and P. Schuck, Eur. Phys. J. **A 7** (2000) 155.
- [22] R.W. Richardson, Phys. Rev. **141** (1966) 949.

- [23] J. Bang, J. Krumlinde, Nucl. Phys. **141** (1970) 18.
- [24] F. Braun, J. von Delft, Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 4712.
- [25] J. Dukelsky and G. Sierra, Phys. Rev. Lett. **83** (1999) 172; G. Sierra et. al., Phys. Rev. **B 61** (2000) R11890.
- [26] A. Storozhenko, P. Schuck, J. Dukelsky, G. Röpke and A. Vdovin, Ann. Phys. **307** (2003) 308-334.
- [27] E.H. Lieb, F.Y. Wu, Phys. Rev. Lett. **20**, 1445 (1968).
- [28] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. Ser. A **240**, 539 (1957); *ibid.* Proc. Roy. Soc. Ser. A **243**, 336 (1958).
- [29] Nozières, Schmitt-Rink, J. Low. Temp Phys. **59**, 195 (1985)
- [30] L. Belkhir, M. Randeria, Phys. Rev. B **49**, 6829 (1994).
- [31] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. Ser. A **276**, 238 (1963); *ibid.* Proc. Roy. Soc. Ser. A **277**, 237 (1963).
- [32] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. Ser. A **281**, 401 (1964).
- [33] P.W. Anderson, Phys. Rev. **115**, 2 (1959).
- [34] F. Gebhard, *The Mott Metal Insulator Transition*, Springer Tracts in Modern Physics, Vol. 137 (1997). Florian 3.45, 3.46
- [35] P. Fulde, *Electron Correlations in Molecules and Solids*, Springer Series in Solid-State Sciences **100**, Berlin (1991).
- [36] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, Springer (1994).
- [37] D.J. Thouless, Nucl. Phys. **21** (1960) 225.
- [38] F. Catara, G. Piccitto, M. Sambataro, N. Van Giai, Phys. Rev. **B 54** (1996) 17536.
- [39] F. Aryasetiawan, T. Miyake and K. Terakura, Phys. Rev. Lett. **88** (2002) 166401
- [40] J. M. Luttinger and J. C. Ward, Phys. Rev. **118** (1960) 1417
- [41] P. Nozières,, *Theory of Interacting Fermi Systems*, Benjamin, New York, (1989).
- [42] Y.M. Vilk, L. Chen, A.-M.S. Tremblay, Phys. Rev. B **49**, 13 267 (1994); *ibid.* Physica C **235-240**, 2235 (1994).
- [43] Y.M. Vilk et A.-M.S. Tremblay, J. Phys. I France **7** (1997) 1309-1368
- [44] P. Bénard, L. Chen, A.-M.S. Tremblay, Phys. Rev. B **47**, 15217 (1993).
- [45] S. Allen and A.-M.S. Tremblay, Phys. Rev. B **64**, 075115 (2001).
- [46] B. Kyung, J. S. Landry, A.-M.S. Tremblay, Phys. Rev. B **68**, 174502 (2003).

- [47] A. M. Tremblay, private communication
- [48] G. Seibold, F. Becca, J. Lorenzana, Phys. Rev. B **67**, 085108 (2003).
- [49] M. Grasso and F. Catara, Phys. Rev. C **63**, 014317 (2000).
- [50] D. Janssen and P. Schuck, Z. Physik A **339** (1991) 34-50.
- [51] P. Schuck, A. Storozhenko, private communication
- [52] D. S. Schäfer and P. Schuck, Phys. Rev. B **59**, (1999) 1712-1733
- [53] D. S. Delion, P. Schuck and J. Dukelsky, nucl-th/0405002
- [54] R. Schumann, Ann. Phys. (Leipzig) **11** (2002) 49-87.

Résumé : Dans cette thèse nous avons appliqué la RPA auto-consistante (SCRPA) au modèle de Hubbard avec un petit nombre de sites (une chaîne à 2, 4, 6, ... sites). La SCRPA avait précédemment donné de très bon résultats dans d'autres modèles comme le modèle d'appariement de Richardson. Il était donc intéressant de voir quel genre de résultats la méthode allait produire pour un modèle plus complexe comme le modèle de Hubbard. A notre grande satisfaction le cas à 2 sites et deux électrons (demi-remplissage) est résolu exactement par la SCRPA. Ceci peut sembler un peu trivial mais le fait est que d'autres approximations toute à fait respectables telles que la "GW" ou l'approche avec la fonction d'onde de Gutzwiller restent loin du compte. Avec ce bon point de départ le cas à 6 sites a été regardé ensuite. Pour ce cas la SCRPA n'est, évidemment, plus exacte, cependant les résultats SCRPA s'en écartent uniquement de très peu sur une grande plage de valeurs de la constante de couplage U et notamment dans la région de la transition de phase vers un état avec magnétisation non nulle. Ceci est vrai pour l'énergie du fondamental, les excitations et les nombres d'occupations. On peut considérer cela comme un bon succès de la théorie. Cependant, le cas à 4 sites (plaquette), comme tous les cas à $4n$ sites, pose un problème à cause d'une dégénérescence au niveau Hartree-Fock. Une généralisation de la présente méthode en incluant en plus des paires, des quadruples opérateurs de Fermions (seconde RPA) est proposée pour traiter ces cas dans la présente approche. En effet pour une plaquette, on peut ainsi également retrouver le résultat exact. C'est donc une perspective intéressante de ce travail.

Mots-clés : Problème à N corps, Approximation de champ moyen, RPA, RPA auto-cohérente, Transition de phase, Modèle de Hubbard

Abstract : In the present thesis we have applied the self consistent RPA (SCRPA) to the Hubbard model with a small number of sites (a chain of 2, 4, 6, ... sites). Earlier SCRPA had produced very good results in other models like the pairing model of Richardson. It was therefore interesting to see what kind of results the method is able to produce in the case of a more complex model like the Hubbard model. To our great satisfaction the case of two sites with two electrons (half-filling) is solved exactly by the SCRPA. This may seem a little trivial but the fact is that other respectable approximations like "GW" or the approach with the Gutzwiller wave function yield results still far from exact. With this promising starting point, the case of 6 sites at half filling was considered next. For that case, evidently, SCRPA does not any longer give exact results. However, they are still excellent for a wide range of values of the coupling constant U , covering for instance the phase transition region towards a state with non zero magnetisation. We consider this as a good success of the theory. Non the less the case of 4 sites (a plaquette), as indeed all cases with $4n$ sites at half filling, turned out to have a problem because of degeneracies at the Hartree-Fock level. A generalisation of the present method, including in addition to the pairs, quadruples of Fermions operators (called second RPA) is proposed to also include exactly the plaquette case in our approach. This is therefore a very interesting perspective of the present work.

Keywords : Many-body problem, Mean-field approximation, RPA, Self consistent RPA, Phase transition, Hubbard Model